

N. E. Aly.

Frankfurt a. M. 1980



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550820_0023

Untersuchung der Corioliskopplung und
Relaxationszeiten in Quasimolekülen am Beispiel
des Uran-Uran-Systems

Inaugural - Dissertation
zur
Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften
vorgelegt beim Fachbereich Physik der
Johann Wolfgang Goethe Universität
zu Frankfurt am Main

von
Noureldin Elsayed Aly
aus
Alexandria / Ägypten

Frankfurt am Main

1979



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik der
Johann Wolfgang Goethe - Universität zu Frankfurt am Main

Dekan :	Prof.Dr. D. Wolf
Leiter der Arbeit :	Prof.Dr. W. Greiner
Erstgutachter :	Prof.Dr. W. Greiner
Zweitgutachter :	Prof.Dr. B. Müller

Tag der mündlichen Prüfung : 11.1.1980

Inhaltsverzeichnis:

	Seite
Einleitung	1
I. Dynamische Beschreibung des Schwerionen- stoßes	7
I.1 Halbklassische Näherung	7
I.2 Die quantenmechanische Theorie des Schwerionen- stoßes	10
I.3 Mitrotierende Koordinaten	12
II. Die Zweizentren-Diracgleichung	17
II.1 Die Lösung der Zweizentren-Diracgleichung	17
II.2 Die zeitabhängige Störungstheorie	24
II.3 Die Lösung der Zweizentren-Diracgleichung mit Coriolis-Kopplung	29
II.4 Die Wechselwirkungsmatrixelemente mit Coriolis-Kopplung	32
III. Die Relaxationszeit der Elektronen in Quasi- molekülen	35
III.1 Die formale Herleitung	35
III.2 Die Berechnung der Relaxationszeit der Elek- tronen	41
III.3 Die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit	44
III.4 Unitarität	50
IV. Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse	52

V.	Anhang	59
V.1	Berechnung der Relaxationszeit in der zweiten Quantisierung	59
V.2	Berechnung der Matrixelemente	65
	Literaturverzeichnis	71
	Figurenbeschreibung	75

Einleitung

Stoßvorgänge zwischen Target-Atomen und Projektil-Ionen beschäftigen schon seit langem theoretisch und experimentell arbeitende Atomphysiker. Insbesondere hat die Erforschung der Prozesse, die sich in den inneren Schalen während eines solchen Stoßes schwerer Systeme ereignen, in den letzten Jahren wachsendes Interesse erfahren.

Mit Hilfe von Schwerionen-Beschleunigern ist es möglich, Atomkerne mit hohen Ladungszahlen Z_1 und Z_2 so weit anzunähern, daß die inneren Elektronenhüllen für kurze Zeit verschmelzen und sich molekulare Orbitale ausbilden können. Die "Umlaufszeit" der Elektronen in den inneren Schalen ist kleiner als die Stoßzeit zwischen Projektil-Ion und Target-Atom (Adiabasie). Wir sprechen dann von Quasimolekülen und insbesondere von überschweren Quasimolekülen, wenn die Summe der Kernladungen Z größer als 106 ist, $Z > 106$.

Im folgenden werden wir immer "langsame" Stöße betrachten, wenn wir Quasimoleküle und das Verhalten von Materie in starken elektrischen und magnetischen Feldern studieren.

Um die molekularen Zustände zu beschreiben, wird normalerweise die Schrödinger-Gleichung in der Born-Oppenheimer⁽¹⁾-Näherung gelöst. Dabei nimmt man an, daß die Elektronen in der Lage sind, sich den Änderungen des Kernfeldes auf Grund der Bewegung der beiden Kerne anzupassen. Für jede Konfiguration der beiden Kerne werden die Elektronenzustände berechnet, indem die Kerne als momentan fest angenommen werden. Dann hängt die Elektronenwellenfunktion nur noch parametrisch von den Koordinaten der beiden Kerne ab, und die Kernwellenfunktion wird durch die potentielle Energie der Elektronen für die verschiedenen internuklearen Konfigurationen mitbestimmt.

W. Heitler und F. London⁽²⁾ haben im Jahr 1927 zum ersten Mal die Bindungsenergie für Wasserstoff und Helium-Moleküle berechnet. Es folgten die Arbeiten von Hund⁽³⁾(1927), Burrau⁽⁴⁾(1927), Mulliken⁽⁵⁾(1928) und Morse/Stueckelberg⁽⁶⁾(1929). Sie haben die Energie verschiedener Molekularorbitale für kleine und große Zweizentrenabstände mit Hilfe der Störungstheorie berechnet.

E. Teller⁽⁷⁾(1930), Hylleraas⁽⁸⁾(1931) und Jaffe⁽⁹⁾(1934) gaben eine mathematisch exakte Lösung des nicht-relativistischen Einelektronenproblems ohne Spin an.

Bates^(10,11) et.al. veröffentlichten (1953) eine Tabelle von Energien und Wellenfunktionen für die zehn niedrigsten Molekülorbitale des H_2^+ -Iones im Bereich

$0 \leq R \leq 10$. a.u. . Bates⁽¹²⁾ und Carson (1956), Gershtein und Krivchenkov⁽¹³⁾(1961), Wilson und Gallup⁽¹⁴⁾(1966) und Helfrich und Hartmann⁽¹⁵⁾(1970) lösten die Schrödingergleichung für asymmetrische Einelektronensysteme. Luke⁽¹⁶⁾ et.al. (1969) berücksichtigten bei der Lösung der Zweizentren-Schrödingergleichung relativistische Korrekturen, die sie mit Hilfe der Störungstheorie in erster Ordnung bestimmten.

In den letzten Jahren nun hat sich ein verstärktes Interesse auf die Atomphysik in Schwerionenstößen gerichtet. Das liegt zum Teil an der Verbesserung experimenteller Techniken, z.B. hochempfindlicher Halbleiterdetektoren für Röntgenstrahlung, als auch am Bau leistungsfähiger Beschleuniger, die ganz neue Bereiche von Streuenergien erschließen. Mit Hilfe der Schwerionenbeschleuniger in Berkeley, Dubna und bei der GSI zwischen Frankfurt und Darmstadt kann man Atomkerne mit einer hohen Ladungszahl kurzzeitig einander soweit annähern, daß auch die inneren Elektronenschalen dem Feld beider Kerne gleichermaßen angehören und sich Molekülzustände ausbilden. Durch den Schwerionenbeschleuniger UNILAC der GSI (Gesellschaft für Schwerionenforschung) ist es möglich geworden, Projektile bis zum Uran ($Z = 92$) auf Energien bis zu $\simeq 10$ MeV/Nukleon zu beschleunigen.

Wir werden uns im folgenden besonders mit dem Stoß sehr schwerer Systeme befassen (U-U, Pb-Pb) und die rela-

tivistischen Effekte bei der Bildung superschwerer Quasimoleküle untersuchen. Zur Beschreibung der superschweren Quasimoleküle verwenden wir die Zweizentren-Diracgleichung, die zum ersten Mal von Müller⁽¹⁷⁾(1973) durch Diagonalisierung des Hamiltonoperators gelöst wurde. Rafelski und Müller⁽¹⁸⁾(1976) lösten die Zweizentren-Diracgleichung durch numerische Integration. Mittlerweile hat Betz⁽⁴⁴⁾(1979) in einer Reihe von Arbeiten diese Methode systematisch ausgebaut und angewandt.

Dabei wurden dynamische Effekte wie die Corioliskopplung auf Grund der Rotation der Verbindungsachse zwischen den beiden Kernen während des Stoßes und auch Relaxationszeiten der Elektronen auf Grund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung nicht berücksichtigt.

In dieser Arbeit wird nun der Einfluß der Corioliskopplung auf die Energiezustände der Zweizentren-Diracgleichung für das U-U System untersucht und das Verhältnis zwischen Relaxationszeit der Elektronen und Stoßzeit der Teilchen berechnet.

In Kapitel I untersuchen wir zunächst den Schwerionenstoß. Da die Relativgeschwindigkeit von Target-Atom und Projektil-Ion weniger als ein Zehntel der Lichtgeschwindigkeit beträgt, können wir die Bewegung der Atomkerne nichtrelativistisch behandeln und die halbklassische Näherung verwenden. Da die Molekulare Achse während

des Stoßes rotiert, beschreiben wir die Elektronenbewegung im mitrotierenden Koordinatensystem. Dazu zerlegen wir den Hamilton-Operator in zwei Teile, einen radialen und einen Coriolis-Anteil.

In Kapitel II lösen wir die Zweizentren-Diracgleichung unter Einfluß der Corioliskopplung und erhalten die neuen Zweizentren-Diracwellenfunktionen, welche die quasimolekularen Zustände während eines adiabatischen Schwerionenstoßes beschreiben. Wir diskutieren die zeitabhängige Störungstheorie für diese Zustände und untersuchen die Anregung von $1S_{\sigma}$ -Elektronen in höhere gebundene nS_{σ} -Zustände von superschweren Quasimolekülen. Dazu berechnen wir die relativistischen Matrixelemente und Bindungsenergien für die acht am stärksten gebundenen Molekülzustände ($1S_{\frac{1}{2}\sigma}$, $2P_{\frac{1}{2}\sigma}$, $2S_{\frac{1}{2}\sigma}$, $2P_{\frac{3}{2}\sigma}$, $2P_{\frac{3}{2}\pi}$, $3P_{\frac{1}{2}\sigma}$, $3S_{\frac{1}{2}\sigma}$, $4S_{\frac{1}{2}\sigma}$) des U-U Systems und vergleichen die Ergebnisse mit den von W. Betz⁽³⁵⁾ erhaltenen ohne die Corioliskopplung. Dabei finden wir, daß die Corioliskopplung auf die Matrixelemente der nS_{σ} -Zustände keinen großen Einfluß hat. Dagegen unterscheiden sich die radialen Matrixelemente zwischen verschiedenen $nP_{m\sigma}$ -Zuständen mit Corioliskopplung von den Matrixelementen ohne Corioliskopplung bis zu etwa 15%.

In Kapitel III untersuchen wir das dynamische Verhalten des Elektronensystems während eines Schwerionenstoßes und berechnen die Relaxationszeit der Elektronen

auf Grund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Rahmen der zeitabhängigen Störungstheorie. Wir erhalten daraus das Verhältnis zwischen Relaxationszeit der Elektronen und Stoßzeit der Teilchen. Wir finden, daß die Relaxationszeit auf Grund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung größer ist als die Relaxationszeit der Stoßzeit. Dies zeigt, daß wir die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigen können, die Radialkopplung hingegen ist für die Verwendung der adiabatischen zeitabhängigen Störungstheorie sehr wichtig. Ferner wird eine Näherungsmethode zur Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten angegeben. Wir zeigen auch, daß die von uns berechneten Amplituden die Unitaritätsbeziehung erfüllen.

I. Dynamische Beschreibung des Schwerionenstoßes

In diesem Kapitel wollen wir untersuchen, wie sich die Elektronen im Feld zweier Kerne, die in einem Schwerionenstoß aneinandergestreut werden, verhalten. Für kleine Stoßenergien werden nur die äußeren Elektronenhüllen beteiligt sein, für größere Einschußenergien dagegen wird es zu einer gegenseitigen Durchdringung der Elektronenhüllen kommen. Im molekularen Bild nimmt man an, daß sich die Elektronenkonfiguration adiabatisch ändert, d.h. zu jedem Zeitpunkt besetzen die Elektronen Orbitale, die zu einem hypothetischen Quasimolekül mit den Kernladungen Z_1, Z_2 und dem jeweiligen Abstand $R(t)$ gehören.

Da im U-U System, das in dieser Arbeit hauptsächlich untersucht wird, wegen der hohen Gesamtladungszahl die Elektronen in den inneren Schalen stark gebunden sind, verwenden wir zu ihrer theoretischen Beschreibung die Zweizentren-Diracgleichung, wie sie von Müller et.al. gelöst wurde.

I.1. Halbklassische Näherung

Für den Schwerionenstoß unterhalb der Coulomb-Barriere ist die Relativgeschwindigkeit von Target-Atom und Projektil-Ion weniger als ein Zehntel der Lichtge-

schwindigkeit. Deshalb können wir die Bewegung der Atomkerne nichtrelativistisch behandeln. Zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung wird die Relativwellenfunktion in zwei Teile aufgespalten: Die Kern- und die Elektronenwellenfunktion. Da wir uns aber nicht für die Einzelheiten der Bewegung der Atomkerne interessieren, empfiehlt es sich, diesen Teil der Schrödingergleichung nur näherungsweise zu behandeln. Falls die quantenmechanischen Abweichungen von der klassischen Coulomb-Trajektorie der Atomkerne sehr klein sind, können wir die Relativwellenfunktion durch eine Deltafunktion annähern, wenn wir die Kopplung mit den Elektronen betrachten.

Dies ist dann der Fall, wenn der Wert des Sommerfeldparameters⁽¹⁹⁾ γ

$$\gamma = Z_1 Z_2 e^2 / \hbar v = R_{\min} / \lambda \quad (I.1.1)$$

sehr viel größer als Eins ist: $\gamma \gg 1$.

Wie im rechten Teil der Definitionsgleichung für γ zu sehen ist, ist der Sommerfeldparameter γ gleich dem Verhältnis von halbem Abstand größter Kernannäherung bei Stoßparameter $b = 0$ ($R_{\min} = Z_1 Z_2 e^2 / E_{\text{cm}}$) zur de Broglie-Wellenlänge λ des Projektils im Unendlichen

$$\lambda = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{m_p v} \quad (I.1.2)$$

Für alle Ion-Atom-Stöße unterhalb der Coulomb-Barriere und $Z_1 Z_2 \gg 5$ ist diese Bedingung erfüllt, für einen U-U Stoß an der Coulomb Barriere⁽²⁰⁾ hat man $\eta > 500$. Nur bei Streuvorgängen mit sehr leichten Projektilen (H^+ , α -Teilchen) darf man die Näherung nicht immer machen.

Für die Kern-Trajektorie des Projektils läßt sich dann eine klassische Rutherford-Hyperbel ansetzen. Verwendet wurde hierbei die folgende Parametrisierung

$$R = R_{\min} (\epsilon \cosh \theta + 1) \quad (\text{I.1.3a})$$

$$t = \frac{R_{\min}}{V_{\infty}} (\epsilon \sinh \theta + \theta) \quad (\text{I.1.3b})$$

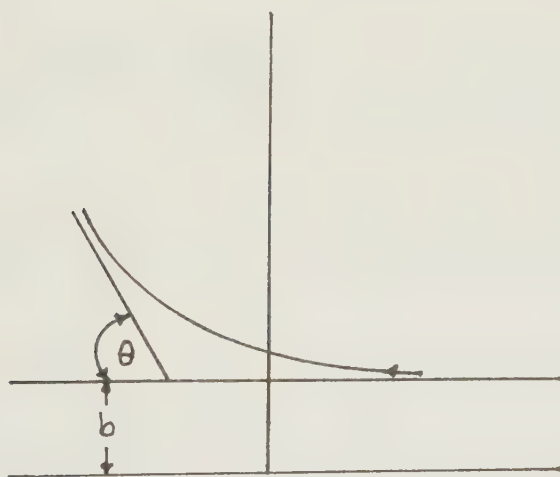


Abb (1)

wobei ϵ die Exzentrizität der Bahn

$$\epsilon^2 = 1 + \frac{b^2}{R_{\min}^2}$$

und V_{∞} die Geschwindigkeit des Projektils für $R \rightarrow \infty$ ist.

I.2. Die quantenmechanische Theorie des Schwerionenstoßes

Im folgenden wollen wir ein Modell zur Beschreibung des Schwerionenstoßes verwenden, um mit dessen Hilfe Hinweise auf mögliche Reaktionskanäle zu erhalten.^(21,22) Da im Hinblick auf die Ionisation der Elektronenschalen lediglich die Elektronenwellenfunktion interessiert, müssen wir nach einer Möglichkeit suchen, die Kernwellenfunktionen aus der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \phi^e \phi^N > = H(t) | \phi^e \phi^N > \quad (I.2.1)$$

zu separieren.^(21,17)

Der Hamilton Operator $H(t)$ besteht aus einem Kern und einem Elektronenanteil:

$$H(t) = \hat{H}_N(\vec{R}) + \hat{H}_D(\vec{r}, \vec{R}) \quad (I.2.2)$$

Der Kernanteil ist gegeben durch:

$$\hat{H}_N(\vec{R}) = \frac{\vec{P}^2}{2\mathcal{M}} + \frac{\hat{L}(\vec{R})^2}{2\mathcal{M}R^2} + V(\vec{R}) \quad (I.2.3)$$

wobei $\mathcal{M}$ die reduzierte Masse und $\hat{L}$ der Drehimpulsoperator der Kerne ist. $\hat{H}_N(\vec{R})$ läßt sich nun durch die

klassische Hamiltonfunktion ersetzen, wenn die quantenmechanische Bewegung der Kerne durch die klassische Rutherford-Hyperbel beschrieben werden kann. Nach Gleichung (I.1.1) ist eine klassische Bahn für die Kernbewegung gerechtfertigt, wenn gilt:

$$\gamma \gg 1 \quad (\text{I.2.4})$$

Dies ist jedoch für unsere Streusysteme bei den hier gegebenen Stoßgeschwindigkeiten immer sehr gut erfüllt. Damit können wir schreiben:

$$\hat{H}_N(R) \Rightarrow H_N = \frac{P^2}{2M} + \frac{L^2}{2MR^2} + V(\vec{R}) . \quad (\text{I.2.5})$$

Weil der Drehimpuls $\vec{L}$ während des Stoßes nicht erhalten bleibt und der Elektronendrehimpuls $\vec{J}$ zusammen mit dem Kerndrehimpuls $\vec{L}$ den Gesamtdrehimpuls $\vec{I}$ ergibt, setzen wir

$$\vec{L} = \vec{I} - \vec{J}$$

in Gleichung (I.2.5) ein und erhalten für den gesamten Hamilton Operator⁽²³⁾:

$$H(t) = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{\hat{I}^2}{2MR^2} - \frac{\hat{I} \cdot \hat{J}}{MR^2} + \frac{\hat{J}^2}{2MR^2} + \hat{H}_D(\vec{r}, \vec{R}(t)) + V(\vec{R}) \quad (\text{I.2.6})$$

Ersetzen wir wegen (I.2.4) den Hamilton Operator $H(t)$ durch die klassische Hamiltonfunktion H_N , so lassen

sich aus (I.2.1) die Kernwellenfunktionen separieren, und wir erhalten eine Differentialgleichung, in der nur die Wellenfunktionen der Elektronen auftreten:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^e(\vec{r}, \vec{R}(t)) = H^e(\vec{r}, \vec{R}(t)) \psi^e(\vec{r}, \vec{R}(t)) \quad (\text{I.2.7})$$

mit

$$H^e(\vec{r}, \vec{R}(t)) = H_D(\vec{r}, \vec{R}(t)) - \frac{\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}}}{\mu R^2} + \frac{\hat{\mathbf{J}}^2}{2\mu R^2} .$$

Den letzten Term der vorhergehenden Gleichung können wir vernachlässigen, da der Elektronenspin viel kleiner als der Gesamtdrehimpuls ist. Für den Hamiltonoperator, der die Bewegung der Elektronen beschreibt, erhalten wir schließlich:

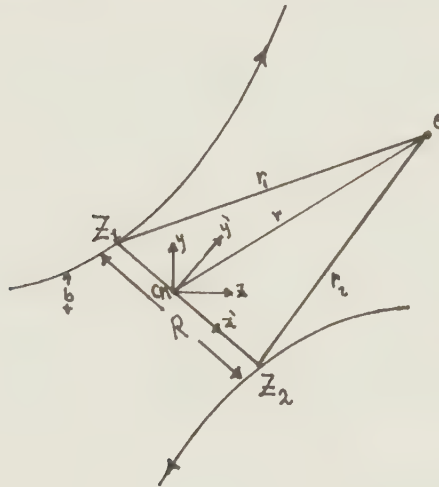
$$H^e(\vec{r}, \vec{R}(t)) = H_D(\vec{r}, \vec{R}(t)) - \frac{\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}}}{\mu R^2} . \quad (\text{I.2.8})$$

Der Term $\frac{\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{J}}}{\mu R^2}$ beschreibt die Coriolis-Kopplung zwischen den Elektronen mit Drehimpuls $\hat{\mathbf{J}}$ und dem Gesamtdrehimpuls $\hat{\mathbf{I}}$.

I.3. Mitrotierende Koordinaten

Wir sind nun soweit, daß wir wie bei der quantenmechanischen Beschreibung der Kernbewegung zum mitrotierenden Koordinatensystem übergehen können. Da die

Schwerpunkte der beiden Kerne in der halbklassischen Näherung zu jedem Zeitpunkt einen genau festgelegten Ort haben, sind die Koordinaten des mitrotierenden Systems zu jedem Zeitpunkt t durch die Angabe der Winkelgeschwindigkeit $\Omega(t)$ dieses Systems festgelegt.



(Abb.2) Das Koordinatensystem zur Beschreibung der Elektronenbewegung im Feld zweier Kerne

Während des Stoßes rotieren die beiden Kerne in der Y-Z Ebene (Abb.2). Um die quasimolekularen Wellenfunktionen zu berechnen, ist es nützlich, die Verbindungslinie der beiden Kerne als Quantisierungsachse zu wählen. Für die Wellenfunktion im rotierenden System schreiben wir

$$\psi = \psi(\vec{r}, \vec{R}(t)) \quad (I.3.1)$$

wobei r' die Koordinaten im neuen System beschreibt, die mit den Koordinaten im alten System wie folgt verknüpft sind:

$$\vec{r}' = \vec{r}'(r', \dot{\theta}(t)) = \vec{r}'(r', \Omega(t)) \quad (\text{I.3.2})$$

$\theta(t)$ entspricht dem Rotationswinkel.

Durch Einsetzen der Transformationsgleichungen⁽²⁴⁾

$$\left. \begin{aligned} x' &= x \\ y' &= y \cos \theta(t) + z \sin \theta(t) \\ z' &= -y \sin \theta(t) + z \cos \theta(t) \end{aligned} \right\} \quad (\text{I.3.3})$$

in die Gleichung (I.2.7) gelangen wir zur Gleichung im rotierenden Koordinatensystem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \nabla(\vec{r}', \vec{R}(t)) &= \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} \nabla(\vec{r}', \vec{R}(t)) + \Omega(t) * \\ &\quad \left\{ (-y \sin \theta(t) + z \cos \theta(t)) \frac{\partial}{\partial y} \right. \\ &\quad \left. + (y \cos \theta(t) - z \sin \theta(t)) \frac{\partial}{\partial z} \right\} \nabla(\vec{r}', \vec{R}(t)) \quad (\text{I.3.4}) \end{aligned}$$

Aus den Gleichungen (I.3.3) und (I.3.4) erhalten wir:

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla(\vec{r}', \vec{R}(t)) = \left\{ \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} + \Omega(t) \left[z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right] \right\} \nabla(\vec{r}', \vec{R}(t))$$

Beachtet man, daß der Ausdruck in der eckigen Klammer (bis auf den Faktor $(-i\hbar)$) genau die X' Komponente des Bahndrehimpulsoperators $\vec{L}$ der einzelnen Elektronen im mitrotierenden System darstellt, so können wir schreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, \vec{R}(t)) = \left[\vec{R} \frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{\hbar} \Omega(t) \cdot \vec{J}_x \right] \psi(\vec{r}, \vec{R}(t)) \quad (I.3.5)$$

Um dies mit dem Ergebnis der quantenmechanischen Überlegungen zu vergleichen, bedenke man, daß die Winkelgeschwindigkeit des mitrotierenden Systems (klassisch) durch den Betrag des Gesamtdrehimpuls ($\vec{I}$)

$$\Omega(t) = \frac{|\vec{I}|}{M R(t)} = \frac{M v_{\infty} b}{M R(t)} = \frac{v_{\infty} b}{R(t)} \quad (I.3.6)$$

gegeben ist,

wobei b der Stoßparameter und v_{∞} die Geschwindigkeit im Unendlichen ist.

Den Hamilton Operator (I.2.8) kann man in zwei Teile zerlegen. Der erste Term ist der Vielteilchen-Zweizentren-Dirac-Hamiltonoperator, der vom Abstand zwischen den beiden Kernen abhängt. Der zweite Term des Hamiltonoperators stellt die Coriolis-Kopplung auf Grund der Relativbewegung der beiden Kerne dar:

$$H^e(t) = H_R^e(t) + H_{\text{cor}}^e(t) \quad (I.3.7)$$

wobei

$$H_R^e(t) = H_D^e(t) + V(\vec{r}, \vec{R}(t))$$

und

$$H_{\text{cor}}^e(t) = - \vec{\Omega}(t) \cdot \vec{J}$$

ist.

II. Die Zweizentren-Diracgleichung

II.1. Die Lösung der Zweizentren-Diracgleichung

Zur Beschreibung der quasimolekularen Zustände, die sich während eines adiabatischen Schwerionenstoßes ausbilden, verwenden wir die Zweizentren-Dirac-Wellenfunktionen. Die Wechselwirkung zwischen den Elektronen wird aus Gründen, die im Kapitel III erläutert werden, vernachlässigt. Die Zweizentren-Diracgleichung⁽¹⁷⁾ schreibt sich dann wie folgt⁽¹⁷⁾:

$$\left[H_{\text{TCD}} - E_n(R(t)) \right] \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) =$$

$$\left[c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_e c + V_1 + V_2 - E_n(R(t)) \right] \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) = 0 \quad (\text{II.1.1})$$

wobei V_1 und V_2 die Coulomb-Potentiale der beiden Kerne sind.

Die Lösung obiger Gleichung wird durch die Wellenfunktion $\phi^M(\vec{r})$ beschrieben, die wir nach Drehimpulsen entwickeln können⁽²⁷⁾:

$$\phi^M(\vec{r}) = \sum_k \phi_k^M(\vec{r}) = \sum_k \begin{pmatrix} g_k(\vec{r}) \chi_k^M \\ i f_k(\vec{r}) \chi_{-k}^M \end{pmatrix} \quad (\text{II.1.2})$$

$g_k(\vec{r})$ und $f_k(\vec{r})$ sind die radialen Wellenfunktionen.
 χ_k^M stellt den von Spin und Winkel abhängigen Teil der Wellenfunktion dar, der mit den Kugelflächenfunktionen $Y_l^{M-m}(\theta, \varphi)$ und den Clebsch-Gordan-Koeffizienten $C(1 \frac{1}{2} j, m-m_2, m_2)$ wie folgt verknüpft ist:

$$\chi_k^M = \sum_{m=\pm \frac{1}{2}} C(1 \frac{1}{2} j, M-m, m) Y_l^{M-m}(\theta, \varphi) \chi^m \quad (\text{II.1.3})$$

χ^m sind die zweikomponentigen Einheitsspinoren:

$$\chi^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Das Zweizentrenpotential wird ebenfalls nach Drehimpulsen entwickelt⁽¹⁸⁾

$$V_{TC}(\vec{r}, \vec{R}(t)) = \sum_l V_l(\vec{r}, \vec{R}(t)) P_l(\cos \theta) \quad (\text{II.1.4})$$

mit

$$V_l(\vec{r}, \vec{R}(t)) = \begin{cases} \frac{-2Z_1 e^2}{R} \left(\frac{2r}{R}\right)^l - \frac{2Z_2 e^2}{R} \left(\frac{-2r}{R}\right)^l, & r < \frac{R}{2} \end{cases} \quad (\text{II.1.5})$$

$$\begin{cases} \frac{-Z_1 e^2}{R} \left(\frac{R}{2r}\right)^l - \frac{Z_2 e^2}{r} \left(\frac{-R}{2r}\right)^l, & r \geq \frac{R}{2} \end{cases} \quad (\text{II.1.6})$$

Der Spin-Bahn-Operator wird durch die Beziehung

$$k = \beta \cdot (\vec{\sigma} \cdot \vec{\ell} + 1)$$

definiert.⁽²⁵⁾

Wir erhalten dann folgende Radialgleichungen für $f_k(\vec{r})$ und $g_k(\vec{r})$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f_k(\vec{r}) &= \frac{k-1}{r} f_k(\vec{r}) - [E-m] g_k(\vec{r}) \\ &+ \sum_{\ell} g_\ell(\vec{r}) V_\ell(\vec{r}, \vec{R}(t)) A_{k\ell s} \end{aligned} \quad (\text{II.1.7})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} g_k(\vec{r}) &= \frac{-k-1}{r} g_k(\vec{r}) + [E+m] f_k(\vec{r}) \\ &- \sum_{\ell} f_\ell(\vec{r}) V_\ell(\vec{r}, \vec{R}(t)) A_{-k\ell s} \end{aligned}$$

mit

$$A_{k\ell s} = \langle \chi_s^M | P_\ell | \chi_k^M \rangle \quad (\text{II.1.8})$$

und

$$\langle \chi_s^M | \chi_k^M \rangle = \delta_{sk}$$

Das Matrixelement $A_{k\ell s}$ läßt sich mit Hilfe von (II.1.3) wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned} A_{s\ell k} &= \sum_{m=\pm\frac{1}{2}} C\left(\ell_s \frac{1}{2} s, m, m\right) C\left(\ell_k \frac{1}{2} k, m, m\right) * \\ &\quad (-1)^{s-m} [(2\ell_s+1)(2\ell_k+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} \ell_s & \ell & \ell_k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} * \\ &\quad \begin{pmatrix} \ell_s & \ell & \ell_k \\ -m+m & 0 & m-m \end{pmatrix} . \end{aligned} \quad (\text{II.1.9})$$

Die letzten zwei Terme der Gleichung stellen die Wignerschen 3J-Symbole dar und sind nur von Null verschieden, wenn die Ungleichung⁽²⁶⁾

$$|\ell_k - \ell| \leq \ell_s \leq \ell_k + \ell \quad (\text{II.1.10})$$

erfüllt ist. Die Drehimpulse ℓ sind von k abhängig

$$\ell_k = \begin{cases} |k| & , \quad k > 0 \\ |k| - 1 & , \quad k < 0 \end{cases} \quad (\text{II.1.11})$$

wobei k durch den Gesamtdrehimpuls j und Bahndrehimpuls ℓ definiert ist.

$$k = \begin{cases} \ell & \text{für } j = \ell - \frac{1}{2} \\ -\ell - 1 & \text{für } j = \ell + \frac{1}{2} \end{cases} \quad (\text{II.1.12})$$

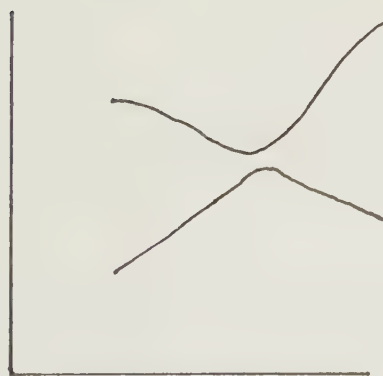
und alle ganzzahligen Werte mit Ausnahme der Null annehmen kann. Wir können jetzt für jeden Abstand R der beiden Kerne die Bindungsenergie der Quasimoleküle berechnen und damit den Verlauf der Energieniveaus zwischen dem vereinigten Atom ($R \rightarrow 0$) und den separierten Atomen ($R \rightarrow \infty$) bestimmen.

Auf Grund der starken dynamischen Kopplung während des Stoßes folgen die Elektronen nicht dem adiabatischen Korrelations-Diagramm, sondern dem sogenannten "diabatischen", d.h. an verbotenen Kreuzungen springt die Besetzungsamplitude mit großer Wahrscheinlichkeit über und folgt der gleichbleibenden Wellenfunktion (Abb.3).

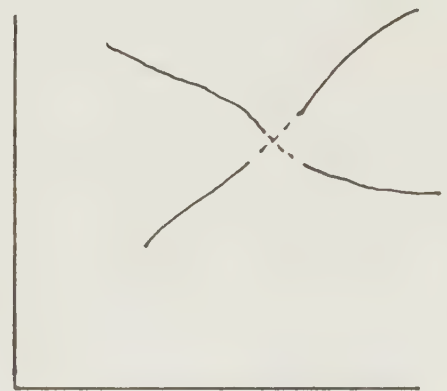
Energiezustände, die eine Funktion von R sind, dürfen sich im adiabatischen Fall unbeeinflusst überkreuzen, wenn es einen Operator A gibt, der mit dem Zweizentren-Dirac-Hamiltonoperator kommutiert und ferner die Eigenwertgleichungen

$$A\psi_1 = a_1\psi_1 \quad \text{und} \quad A\psi_2 = a_2\psi_2 \quad \text{mit} \quad a_1 \neq a_2$$

erfüllt.



adiabatisch



diabatisch

(Abb.3)

Diese Bedingung erfüllen sowohl der J_Z -Operator bei symmetrischen und asymmetrischen Systemen und der βP -Operator bei symmetrischen Systemen. Deshalb dürfen sich σ und π Zustände beliebig kreuzen. Dasselbe gilt auch für Zustände verschiedener Parität, jedoch nur im symmetrischen Fall. Die Kreuzungspunkte zweier Zustände in einem Korrelationsdiagramm bezeichnet man als Niveaure Kreuzung. Im allgemeinen ist das Kreuzen der Zustände verboten. Demzufolge weichen die Niveaus einander aus, so daß man diesen Effekt als Pseudokreuzung^(3,24,30) bezeichnet.

Für symmetrische Systeme kommutieren der Paritätsoperator P und J_Z mit dem Hamilton Operator, und wir können zwischen geraden und ungeraden molekularen Zuständen unterscheiden.⁽²⁷⁾

Die von Neumann-Wigner'sche⁽²⁸⁾ Regel besagt, daß Zustände, die dieselbe Symmetrie haben, sich nicht schneiden dürfen. Zustände, die zu verschiedenen Darstellungen einer Symmetriegruppe gehören, dürfen sich schneiden. Auf diese Weise können wir das grobe Verhalten der molekularen Zustände durch allgemeine Symmetrie-Argumente verstehen.

Die molekularen Zustände werden nach der Projektion der Komponente m des Gesamtdrehimpulses $\vec{J}$ der Elektronen auf die Verbindungsachse der Kerne klassifiziert, die auf Grund der Zylindersymmetrie der Anordnung eine

gute Quantenzahl ist. Die Orbitale werden nach den Quantenzahlen des vereinigten atomaren Systems ($R \rightarrow 0$) bezeichnet, z.B. $1s_{\frac{1}{2}}$, $2p_{\frac{1}{2}}$, $2s_{\frac{1}{2}}$, $2p_{\frac{3}{2}}$, $2p_{\frac{3}{2}\pi}$

II.2. Die zeitabhängige Störungstheorie

Zunächst wird im Rahmen der zeitabhängigen Störungstheorie die Anregung von $1S_{\sigma}$ Elektronen in höhere gebundene nS_{σ} Zustände von superschweren Quasimolekülen untersucht. Um die zeitabhängige Schrödingergleichung⁽³¹⁾

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{II.2.1})$$

zu lösen, machen wir den Ansatz:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(\hat{t}) d\hat{t} \right\} \quad (\text{II.2.2})$$

d.h. wir entwickeln die zeitabhängige Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$ nach stationären Zuständen der Zweizentren-Diracgleichung (II.1.1). Zu berechnen bleiben die zeitabhängigen Besetzungsamplituden $a_n(t)$ für die verschiedenen Zustände. Setzen wir den Ansatz (II.2.2) in die Schrödingergleichung (II.2.1) ein, so führt dies auf einen unendlichen Satz von gekoppelten Differentialgleichungen erster Ordnung

$$\dot{a}_n(t) = - \sum_m a_m(t) V_{nm}(t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t \{ E_n(\hat{t}) - E_m(\hat{t}) \} d\hat{t} \right] \quad (\text{II.2.3})$$

mit

$$V_{nm}(t) = \langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) | \frac{\partial}{\partial t} | \phi_m(\vec{r}, \vec{R}(t)) \rangle \quad (\text{II.2.4})$$

Das Gleichungssystem (II.2.3) ist vollständig äquivalent zur zeitabhängigen Diracgleichung.

Wir nehmen nun an, daß zur Zeit $t = t_0$ nur ein Zustand ϕ_m besetzt ist und alle anderen Zustände $\phi_n, n \neq m$ leer sind, so daß für die Besetzungsamplituden $a_n(t)$ gilt:

$$a_n(t_0) = \delta_{nm}$$

Dadurch läßt sich das System (II.2.3) in niedrigster Näherung Störungsrechnung sofort integrieren, und wir erhalten:

$$a_n(t) = -a_n^F \int_{t_0}^t dt' \langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) | \frac{\partial}{\partial t'} | \phi_m(\vec{r}, \vec{R}(t')) \rangle \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [E_n(t') - E_m(t')] dt' \right\} \quad (II.2.5)$$

Hierbei wird die Unitarität in der Größenordnung $\sum_n |a_n(t)|^2$ verletzt, wobei über alle angeregten Zustände summiert wird. Es sollte hervorgehoben werden, daß in der Gleichung (II.2.5) keine "never come back"-Näherung enthalten ist, da Oszillationen in der Anregungsamplitude $a_n(t)$ erlaubt sind, die ein Springen der Löcher zwischen den Niveaus beschreiben bis schließlich der Endwert $a_n(t \rightarrow \infty)$ erreicht wird. Der konstante Faktor a_n^F (meistens gleich Null oder Eins) wurde zur Berücksichtigung des Pauli-Prinzips bei den Übergängen $m \rightarrow n$ eingeführt.

In U-U Stößen gilt für die Übergänge $1S \rightarrow 2S$ oder $3S$:

$$a_{2S\sigma}^F \simeq a_{3S\sigma}^F \simeq 0 \quad . \quad (II.2.6)$$

In sogenannten exakten Rechnungen⁽³²⁾ werden die Gleichungen (II.2.3) numerisch gelöst. Jedoch kann nur eine endliche Anzahl von gekoppelten Gleichungen gelöst werden, was den untersuchten Hilbertraum beschränkt. Als erste Näherung zur Lösung des Gleichungssystems wurde oben die zeitabhängige Störungstheorie verwendet. Im Rahmen der gekoppelten Kanalgleichungen führten diese Rechnungen⁽³³⁾ im wesentlichen zu den gleichen Resultaten.

Betrachten wir das Übergangsmatrixelement (II.2.4) im mitrotierenden Koordinatensystem, so stellen wir fest, daß der Operator sich in einen radialen und in einen Rotations-Anteil aufspalten läßt (I.3.4):

$$\frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{\hbar} \vec{\Omega} \cdot \vec{J} \quad . \quad (II.2.7)$$

$\vec{\Omega}(t)$ ist die Winkelgeschwindigkeit der quasimolekularen Achse und $\dot{R}$ ist die Radialgeschwindigkeit des Systems. $\vec{J}$ ist der Gesamtdrehimpuls der Elektronen.

Unter Verwendung von (II.2.7) können wir das Gleichungssystem (II.2.3) wie folgt schreiben:

$$a_n(t) = - \sum_{m \neq n} a_m(t) \langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) | \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} - \frac{i}{\hbar} \vec{\Omega} \cdot \vec{J} | \phi_m(\vec{r}, \vec{R}(t)) \rangle \times \\ \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_t^t [E_n(t') - E_m(t')] dt' \right\} \quad . \quad (II.2.8)$$

Bei symmetrischen Stoßpartnern koppelt der Rotationsanteil ausgehend vom $1S_{\sigma}$ -Niveau zum $3d_{\pi}$ Zustand als dem nächst niedrigsten, da hier die Parität erhalten bleibt. Alle anderen Matrixelemente der tiefer gelegenen Zustände verschwinden bei kleinen Zweizentrenabständen. Auf der anderen Seite koppelt der radiale Anteil an allen $n s, n d, n g$ etc. Zustände. Für spurschwere Quasimoleküle (Pb-Pb, U-U) sind die Werte der $\frac{\partial}{\partial R}$ Matrixelemente für kleine Abstände sehr groß.

Die radialen Matrixelemente nähern sich für große Abstände R einem konstanten Wert an. Da die Molekülzustände asymptotisch für $R \rightarrow \infty$ keine Lösungen des Streuproblems⁽³⁴⁾ darstellen, werden wir bei der Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten die Wellenfunktionen $\phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t))$ durch die Zustände $\phi_n(\vec{R}) \exp(-\frac{i}{2} m \vec{V} \cdot \vec{r})$ ersetzen. Die Exponentialfunktion wird als Translationsfaktor bezeichnet, $\vec{V}$ ist die Projektilgeschwindigkeit. Berücksichtigen wir die Translationsfaktoren bis zur ersten Ordnung in $\vec{V}$, dann erhalten wir folgende korrigierte Matrixelemente:

$$\begin{aligned}
 & \langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m(\vec{r}, \vec{R}(t)) \rangle = \\
 & \langle \phi_n^{(+)}(\vec{r}, \vec{R}(t)) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m^{(+)}(\vec{r}, \vec{R}(t)) \rangle \\
 & - \frac{m}{2} (E_m^{(+)} - E_n^{(-)}) \langle \phi_n^{(-)}(\vec{r}, \vec{R}(t)) | z | \phi_m^{(+)}(\vec{r}, \vec{R}(t)) \rangle \quad (II.2.9)
 \end{aligned}$$

$\phi_n^{(-)}(\vec{r}, \vec{R}(t))$ ist dabei der molekulare Zustand negativer Parität (z.B. $2p_{1/2\sigma^-}$), der asymptotisch in den atomaren Zustand positiver Parität $\phi_n^{(+)}(\vec{r}, \vec{R}(t))$ (z.B. $1s_{1/2\sigma^+}$) übergeht. Dem Operator Z entspricht die Z -Koordinate im intrinsischen System. Die Z -Achse ist entlang der molekularen Achse, der Verbindungsachse zwischen den beiden Kernen, gerichtet. Die radialen Matrixelemente zwischen $1s_{\sigma^-}$ und ns_{σ^-} Zuständen $\langle \phi_n | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m \rangle$ gehen für Abstände größer als 2000 fm sehr rasch gegen Null. Das entspricht in etwa dem Abstand, bei dem die beiden K-Schalen der Stoßpartner sich gegenseitig spüren und zu beeinflussen beginnen. Für Abstände kleiner als 2000 fm werden die Matrixelemente dann schnell größer.

Bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsamplituden wurden die Matrixelemente linear interpoliert. Grundlage der Interpolation waren exakte Berechnungen der Matrixelemente⁽³⁵⁾ bei verschiedenen Abständen. Die Anzahl der Abstände und die Genauigkeit der Interpolation erwies sich als ausreichend.

Für die gebundenen Zustandswellenfunktionen wurden zunächst die Lösungen der Zweizentren - Diracgleichung in der Einelektronennäherung eingesetzt. Die Matrixelemente $\langle \phi_n | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m \rangle$ können wir durch numerisches Differenzieren von $\frac{\partial \phi_m}{\partial R}$ und anschließende Integration direkt berechnen. Es ist jedoch einfacher, unter

Verwendung des Zweizentrenpotentials V_{TC} folgende Umformung vorzunehmen⁽³⁶⁾:

$$\begin{aligned} \langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m(\vec{r}, \vec{R}(t)) \rangle = \\ (E_m - E_n)^{-1} \langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) | \frac{\partial V_{TC}}{\partial R} | \phi_m(\vec{r}, \vec{R}(t)) \rangle \quad (\text{II.2.10}) \end{aligned}$$

Dies setzt allerdings voraus, daß die beiden Wellenfunktionen orthogonalt und Eigenfunktionen des gleichen Hamiltonoperators sind.

II.3 Die Lösung der Zweizentren-Diracgleichung mit Coriolis-Kopplung

In diesem Kapitel untersuchen wir den Einfluß der Rotation des Kern-Kern-Systems auf die Bildung der quasimolekularen Zustände. Der mathematische Teil der Lösung eines quantenmechanischen Problems, auch für den Fall, daß die Hamilton-Funktion die Rotation enthält, reduziert sich im wesentlichen auf die Ermittlung eines vollständigen Systems von normierten orthogonalen Funktionen, die der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_n = H \psi_n = E_n \psi_n \quad (\text{II.3.1})$$

genügen. Dabei nehmen wir an, daß H nicht explizit von der Zeit abhängt. Ein solches System wird als Basissystem bezeichnet, und durch seine Angabe ist das Problem vom mathematischen Standpunkt aus gelöst. Falls der Hamiltonoperator H' die Rotation nicht explizit enthält, können wir ein Basissystem sofort hinschreiben, wenn wir nur die Eigenfunktionen ϕ_n von H' kennen, die folgende Eigenwertgleichung erfüllen:

$$H \phi_n = \epsilon_n \phi_n \quad (\text{II.3.2})$$

Die Lösungen ψ_n der Schrödingergleichung (II.3.1) lassen sich dann nach den Eigenfunktionen ϕ_n von H' entwickeln

$$\psi_n = \sum_n a_n \phi_n \quad (\text{II.3.3})$$

wobei die a_n die Änderung der Energie beschreiben. Zur Lösung der Gleichung (II.3.1) zerlegen wir den Hamiltonoperator H in zwei Teile

$$H(\vec{r}, \vec{R}(t), \Omega(t)) = H(\vec{r}, \vec{R}(t)) + H_0(\Omega(t)) \quad (\text{II.3.4})$$

wobei $H_0(\Omega(t))$ der Rotationsterm des Hamiltonoperators

$$H_0(\Omega(t)) = -\vec{\Omega} \cdot \vec{J} = \frac{\gamma \cdot b}{R^2} \cdot J \quad (\text{II.3.5})$$

und $\hat{H}(\vec{r}, \vec{R}(r))$ der Radialterm des Hamiltonoperators

$$\hat{H}(\vec{r}, \vec{R}(t)) = \sum_n |\phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t))\rangle \epsilon_n(\vec{R}(t)) \langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t))| \quad (\text{II.3.6})$$

ist. Setzen wir Gleichung (II.3.4) in Gleichung (II.3.1) ein, erhalten wir folgenden Ausdruck:

$$(\hat{H} - \vec{\Omega} \cdot \vec{J}) \psi_n = E_n \psi_n \quad (\text{II.3.7})$$

Diese Gleichung können wir in der Basis der ψ_n (II.3.3) diagonalisieren und erhalten damit die Bindungsenergien der einzelnen Zustände während des Stoßes wie sie in Figur (1) zu sehen sind. Die durchgezogenen Kurven sind mit Rotationskopplung, die gestrichelt gezeichneten ohne Rotationskopplung gerechnet. Eine ausführlichere Diskussion wird in Kapitel V. vorgenommen.

II.4. Die Wechselwirkungsmatrixelemente mit Coriolis-Kopplung

Die radialen Matrixelemente und die Rotationsmatrixelemente zwischen den verschiedenen quasimolekularen Zuständen erhalten wir durch Differentiation der Gleichung (II.3.7) nach der Winkelgeschwindigkeit Ω :

$$\frac{\partial}{\partial \Omega} [\{H - \vec{\Omega} \cdot \vec{J}\} |\psi_n\rangle] = \frac{\partial}{\partial \Omega} \{E_n |\psi_n\rangle\} \quad (\text{II.4.1})$$

Wegen der Orthogonalitätsrelationen

$$\int \psi_m^* \frac{\partial H}{\partial \Omega} \psi_n d\tau = 0 \quad (\text{II.4.2})$$

$$\int \psi_m^* \frac{\partial E_n}{\partial \Omega} \psi_n d\tau = 0$$

gilt:

$$\langle \psi_m | (H - \vec{\Omega} \cdot \vec{J}) \frac{\partial}{\partial \Omega} |\psi_n\rangle = E_m \langle \psi_m | \frac{\partial}{\partial \Omega} |\psi_n\rangle \quad (\text{II.4.3})$$

Setzen wir die Gleichungen (II.4.2), (II.4.3) in Gleichung (II.4.1) ein, erhalten wir:

$$\langle \psi_m | \frac{\partial}{\partial \Omega} |\psi_n\rangle = (E_m - E_n)^{-1} \langle \psi_m | \frac{\partial (\vec{\Omega} \cdot \vec{J})}{\partial \Omega} |\psi_n\rangle \quad (\text{II.4.4})$$

$(E_m - E_n)$ ist die Energiedifferenz der beiden betrach-

teten Zustände ψ_m und ψ_n . Für die zeitabhängige Wellenfunktion ψ machen wir den Ansatz

$$\psi = \sum_n C_n(t) \psi_n \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \epsilon_n(t) dt \right\} \quad (\text{II.5.5})$$

mit zeitabhängigen Entwicklungskoeffizienten $C_n(t)$. Setzen wir diesen Ansatz in Gleichung (II.4.4) ein, so erhalten wir zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten $C_n(t)$ folgendes System gekoppelter Differentialgleichungen:

$$\dot{C}_n(t) = - \sum_{m \neq n} C_m(t) V_{mn} \exp \frac{i}{\hbar} W_{mn} \quad (\text{II.4.6})$$

mit

$$V_{mn} = \langle \psi_m | \frac{\partial}{\partial t} | \psi_n \rangle$$

und

$$W_{mn} = \int_0^t (\epsilon_m(t) - \epsilon_n(t)) dt$$

Wenden wir den $\frac{\partial}{\partial t}$ -Operator auf Gleichung (II.3.7) an, erhalten wir:

$$\frac{\partial}{\partial t} \{ (H - \vec{\Omega} \cdot \vec{J}) | \psi_n \rangle \} = \frac{\partial}{\partial t} \{ E_n | \psi_n \rangle \}. \quad (\text{II.4.7})$$

Da wir die Stoßdynamik im System der rotierenden Kerne beschreiben wollen, zerlegen wir den $\frac{\partial}{\partial t}$ -Operator in

einen Radial- und einen Rotationsanteil:

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} + \dot{\Omega} \frac{\partial}{\partial \Omega} \quad (\text{II.4.8})$$

Setzen wir diese Beziehung in (II.4.7) ein und multiplizieren von links skalar mit χ_m , so erhalten wir schließlich:

$$\langle \chi_m | \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} + \dot{\Omega} \frac{\partial}{\partial \Omega} | \chi_n \rangle = (\xi_n - \xi_m)^{-1} \langle \chi_m | \dot{R} \frac{\partial V}{\partial R} - \dot{\Omega} \frac{\partial (\vec{\Omega} \cdot \vec{J})}{\partial \Omega} | \chi_n \rangle \quad (\text{II.4.9})$$

Die radialen Matrixelemente bezeichnen wir mit Hilfe des Hellman-Feynman-Theorems⁽⁴⁰⁾:

$$\langle \chi_m | \frac{\partial}{\partial R} | \chi_n \rangle = (\xi_n - \xi_m)^{-1} \langle \chi_m | \frac{\partial V(\vec{r}, \vec{R}(t))}{\partial R} | \chi_n \rangle \quad (\text{II.4.10})$$

$V(\vec{r}, \vec{R}(t))$ ist das Zweizentrenpotential für symmetrische Systeme und Punktkerne. Da die Radialgeschwindigkeit $\dot{R}$ sich während des Stoßes ändert, haben wir in den Figuren (5)-(8) statt der $(\dot{R} \frac{\partial}{\partial R} + \dot{\Omega} \frac{\partial}{\partial \Omega})$ -Matrixelemente die $(\frac{\partial}{\partial R} - \frac{2\Omega}{R} \frac{\partial}{\partial \Omega})$ -Matrixelemente gezeichnet.

III. Die Relaxationszeit der Elektronen in Quasimolekülen

III.1. Die formale Herleitung

Bei der Bildung superschwerer Quasimoleküle im Schwerionenstoß kann der Zerfall des neutralen Vakuums in überkritischen elektrischen Feldern^(38,39) untersucht werden. Auch versucht man die Röntgenstrahlung der superschweren Quasimoleküle⁽³⁷⁾ zu beobachten. Das Interesse an der Erforschung der superschweren Quasimoleküle ist groß, da es hier verschiedene Arten von Mechanismen gibt, die möglicherweise auf neue Effekte in der Quantenelektrodynamik in starken äußeren Feldern führen könnten.

Wir wollen in diesem Abschnitt nur das dynamische Verhalten des Elektronensystems während eines Schwerionenstoßes untersuchen. Die Lösung des dynamischen Problems setzt voraus, daß die Basiszustände geeignet gewählt werden; denn es könnte sein, daß auf Grund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung die zu Beginn des Stoßes gewählten Basiszustände zu schnell entvölkert werden. Die charakteristische Zeit, in der dies geschieht, wird Relaxationszeit genannt. Aus diesem Grunde wollen wir im folgenden die zeitabhängige Störungstheorie etwas näher untersuchen und überprüfen, in wieweit wir damit die dynamischen Prozesse während eines Schwerionen-

stoßes beschreiben können.

Zur Beschreibung des dynamischen Verhaltens der Elektronen im Schwerionenstoß verwendet man zweckmäßigerweise Zweizentrenwellenfunktionen. Smith, Müller und Greiner⁽²¹⁾ haben die quantitative Beschreibung der Stoß-Dynamik für Energien unterhalb der Coulomb-Barriere mit Hilfe der Zweizentren-Diracwellenfunktionen gelöst.

Im folgenden nehmen wir an, daß die Relativgeschwindigkeit der beiden Kerne langsam ist, damit die Elektronen (zumindest in den inneren Schalen) den adiabatischen Niveaus folgen können, die zu einem hypothetischen Quasimolekül mit den Kernladungen Z_1, Z_2 und dem jeweiligen Abstand $R(t)$ gehören. Zu lösen ist die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, \vec{R}(t)) = H(\vec{r}, \vec{R}(t)) \psi(\vec{r}, \vec{R}(t)) \quad (\text{III.1.1})$$

wobei $R(t)$ der Abstand zwischen den beiden Kernen und $\vec{r}$ die Koordinaten der Elektronen beschreibt.

Die relativistische Bewegung der Elektronen wird im Hamiltonoperator $\hat{H}$ durch die Verwendung des Diracoperators $(c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta m_e c^2)$ beschrieben. Die Rotation der Kernachse wird durch die Beziehung $\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} \vec{\Omega} \cdot \vec{J}$ berücksichtigt. $\vec{\Omega}$ ist die Winkelgeschwindigkeit der quasimolekularen Achse und $\vec{J}$ des Gesamtdreh-

impuls der Elektronen.

Da der Hamiltonoperator H nur die statische Coulombwechselwirkung enthält, hängen die Eigenzustände der Elektronen nur parameterartig über $R(t)$ von der Zeit ab. Um die zeitabhängige Schrödingergleichung (III.1.1) zu lösen, zerlegen wir H in zwei Teile:

$$H(\vec{r}, \vec{R}(t)) = \hat{H}(\vec{r}, \vec{R}(t)) + H_0(\vec{r}, \vec{R}(t)) \quad (\text{III.1.2})$$

$H_0(\vec{r}, \vec{R}(t))$ beschreibt den ungestörten Teil des Hamiltonoperators, der den Diracoperator enthält, mit Eigenfunktionen $\phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t))$

$$H_0(\vec{r}, \vec{R}(t)) = \sum_n |\phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t))\rangle E_n(R(t)) \langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t))|, \quad (\text{III.1.3})$$

die zu jedem Zeitpunkt t ein vollständiges, orthogonales Funktionssystem bilden. Summation bedeutet hier auch Integration über das kontinuierliche Spektrum. $\hat{H}(\vec{r}, \vec{R}(t))$ ist der Störoperator und beschreibt die Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

Zur Lösung der Gleichung (III.1.1) machen wir den Ansatz:

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}(t)) = \sum_n a_n(t) |\phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t))\rangle \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(R(\tilde{t})) d\tilde{t}\right\} \quad (\text{III.1.4})$$

Setzen wir diesen Ansatz in die Schrödingergleichung ein, so erhalten wir einen unendlichen Satz gekoppelter Differentialgleichungen:

$$\dot{a}_n(t) = \sum_m a_m(t) V_{nm}(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [E_m(R(t)) - E_n(R(t))] dt \right\}, \quad (\text{III.1.5})$$

mit

$$V_{nm}(t) = V_{mn}^*(t) = \left\langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) \left| \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} H(\vec{r}, \vec{R}(t)) \right| \phi_m(\vec{r}, \vec{R}(t)) \right\rangle.$$

Als Anfangsbedingung wählen wir

$$a_n(t_0) = \delta_{n0}$$

d.h. wir nehmen an, daß sich das System zur Zeit t_0 im Grundzustand $\phi_0(\vec{r}, \vec{R}(t))$ befindet. In der normalen adiabatischen Näherung nimmt man weiterhin an, daß die Abweichung der exakten Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, \vec{R}(t))$ vom Anfangszustand $\phi_0(\vec{r}, \vec{R}(t))$ klein ist.

$$a_0(t) \simeq a_0(t_0) = 1$$

$$|a_n(t)| \ll a_0(t_0) \quad (\text{III.1.6})$$

und, daß $V_{nm}(t)$ eine langsam veränderliche Funktion der Zeit ist im Vergleich zur stark oszillierenden

Exponentialfunktion in Gleichung (III.1.5). Dann kann das Gleichungssystem (III.1.5) leicht gelöst werden.

Die Abweichung der Amplitude $a_0(t)$ von ihren Anfangswert $a_0(t_0) = 1$ ist nun ein Maß dafür, wie schnell sich unser Anfangsgrundzustand durch die Bevölkerung angeregter Zustände während des Stoßprozesses ändert. Natürlich können wir versuchen, die Basisfunktionen $\phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t))$ so zu wählen, daß die Amplitude $a_n(t)$ nur schwach von der Zeit abhängt und somit das adiabatische Bild zuverlässig ist.

Zur Vereinfachung setzen wir

$$a_n(t) = C_n(t) \exp \left\{ -i \int_{t_0}^t V_{nn}(\tilde{t}) d\tilde{t} \right\} \quad (\text{III.1.7})$$

und erhalten dann aus (III.1.5) folgendes System gekoppelter Differentialgleichungen:

$$\dot{C}_n = - \sum_{m \neq n} C_m V_{nm}(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \sigma_{nm}(\tilde{t}) d\tilde{t} \right\}, \quad (\text{III.1.8})$$

wobei

$$\sigma_{nm}(t) = E_n(R(t)) - E_m(R(t)) - i\hbar (V_{nn}(t) - V_{mm}(t))$$

ist.

Die Koeffizienten $C_n(t)$ geben dieselben Übergangswahrscheinlichkeiten wie $a_n(t)$

$$|C_n(t)|^2 = |a_n(t)|^2$$

und ebenfalls dieselben Anfangswerte

$$C_n(t) = C_n(t_0) \delta_{n0} = a_n(t) \delta_{n0} = \delta_{n0}.$$

Deshalb verwenden wir im folgenden die Gleichungen (III.1.8) statt (III.1.5).

Wenn das diagonale Matrixelement V_{nn} von Null verschieden ist, entspricht die Phasentransformation in (III.1.7) einer Energieverschiebung des Zustands $\phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t))$

$$E_n(R(t)) = E(R(t)) - i\hbar V_{nn}(t) \quad (\text{III.1.9})$$

und in diesem Sinne wird der diagonale Teil der Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Rahmen der von uns gewählten Basis der adiabatischen Zustände berücksichtigt.

III.2. Die Berechnung der Relaxationszeit der Elektronen

Um die Relaxationszeit der Elektronen zu berechnen, entwickeln wir die Amplitude $C_0(t)$ in eine Taylor-Reihe um den Zeitpunkt t_0 . Verwenden wir Gleichung (III.1.8) und die Anfangsbedingungen, so können wir $C_0(t)$ schreiben als

$$C_0(t) = C_0(t_0) \left[1 - \frac{(t-t_0)^2}{2!\tau^2} + \dots \right] \quad (\text{III.2.1})$$

wobei τ die Relaxationszeit der Elektronen ist

$$\tau^2 = \left[\sum_{m \neq 0} |V_{m0}(t)|^2 \right]_{t=t_0} \quad (\text{III.2.2})$$

Die eingeführte Größe τ können wir als Zeit interpretieren, in der $C_0(t)$ deutlich von $C_0(t_0)$ abweicht, in anderen Worten: es ist die charakteristische Zeit, in der der Anfangszustand entvölkert wird.

Ist die Relaxationszeit τ größer als die Stoßzeit, so zeigen uns die Gleichungen (III.1.8) und (III.2.2), daß das adiabatische Bild (definiert durch Gleichung (III.1.6)) im allgemeinen zuverlässig ist. Man kann sagen, daß die nicht diagonalen Matrixelemente des exakten Hamiltonoperators die Übergänge von einem Zustand zu anderen verursachen, so daß wir, wenn immer die Relaxationszeit τ viel größer ist als die Stoß-

zeit, die adiabatische Störungstheorie zur Lösung unseres Problems verwenden können.

Wir können jetzt die Relaxationszeit für den U-U Stoß ausrechnen. Unsere Basiswellenfunktionen werden von Ein-Elektronen-Zweizentren-Diracwellenfunktionen gebildet.

In diesem Fall haben die Matrixelemente V_{nm} die Form:

$$V_{nm}(t) = \left\langle \phi_n(\vec{r}, \vec{R}(t)) \left| \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} W \right| \phi_m(\vec{r}, \vec{R}(t)) \right\rangle, \quad (\text{III.2.3})$$

wobei W die Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist.

In der Sprache der zweiten Quantisierung können wir τ nach einigen Umformungen (siehe Anhang V.1.) wie folgt schreiben:

$$\tau^{-2} = \left[\dot{R}^2 \sum_{\substack{M \notin F \\ \alpha \in F}} \left| \langle M | \frac{\partial}{\partial R} | \alpha \rangle \right|^2 + \frac{1}{2\hbar^2} \left\{ \sum_{\substack{M, \nu \notin F \\ \alpha, \beta \in F}} \langle M \nu | W | \alpha \beta \rangle \langle \alpha \beta | \tilde{W} | M \nu \rangle \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{\substack{M \notin F \\ \alpha, \beta, \gamma}} \langle \gamma \beta | W | \gamma M \rangle \langle \alpha M | \tilde{W} | \alpha \beta \rangle \right\} \right]_{t=t_0} \quad (\text{III.2.4})$$

wobei F die Menge der besetzten Zustände bezeichnet.

$\tilde{W}$ enthält die Austauscheffekte

$$\langle \alpha \beta | \tilde{W} | \gamma \delta \rangle = \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \langle \alpha \beta | W | \gamma \delta \rangle - \langle \alpha \beta | W | \delta \gamma \rangle. \quad (\text{III.2.5})$$

In unserer Rechnung sind zur Zeit t_0 die molekularen Zustände $1S_{\frac{1}{2}\sigma}$, $2P_{\frac{1}{2}\sigma}$ und $2S_{\frac{1}{2}\sigma}$ besetzt, alle anderen leer. Die Summation über angeregte Zustände (M, γ) haben wir auf den Raum der $2P_{\frac{3}{2}\sigma}$, $3S_{\frac{1}{2}\sigma}$, $3P_{\frac{1}{2}\sigma}$ und $4S_{\frac{1}{2}\sigma}$ -Zustände beschränkt.

Höhere Zustände sind aus Einfachheitsgründen wegen der dann häufig auftretenden Niveauekreuzungen nicht berücksichtigt worden (siehe Fig.1).

Der erste Term in Gleichung (III.2.4) beschreibt den Teil der Relaxationszeit, der von der Radialkoppelung herrührt, die anderen Terme beschreiben die Relaxationszeit auf Grund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung.

Es liegt deshalb nahe, Gleichung (III.2.4) wie folgt zu schreiben:

$$\tau^{-2} = \tau_R^{-2} + \tau_W^{-2} \quad (\text{III.2.6})$$

In unserer Rechnung ist die Wechselwirkungszeit gleich der Flugzeit⁽²⁰⁾ des Projektils durch den Wechselwirkungsbereich, den wir modellhaft als eine Kugel vom Radius $R \approx 100$ fm angenommen haben

$$(\tau_{\text{coll}} \approx 0.5 \times 10^{-19} \text{ sec}).$$

III.3 Die Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit

Zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit wollen wir ein Verfahren anwenden, das uns auch eine Näherungslösung für die Amplituden $C_n(t)$ für den Fall liefert, daß die Anwendbarkeit der adiabatischen Störungsrechnung zweifelhaft ist.

Statt (III.1.8) schreiben wir folgendes äquivalente Gleichungssystem:

$$\dot{C}_0(t) = \sum_{m \neq 0} C_m(t) V_{m0}^*(t) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \sigma_{m0}(t') dt' \right\} \quad (\text{III.3.1a})$$

$$\dot{C}_m(t) = -C_0(t) V_{m0}(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \sigma_{m0}(t') dt' \right\} - \sum_{\substack{n \neq m \\ n \neq 0}} C_n(t) V_{nm}(t) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \sigma_{mn}(t') dt' \right\} \quad (\text{III.3.1b})$$

Der Einfachheit wegen wird die Anfangszeit t_0 Null gesetzt. Der zweite Term der Gleichung (III.3.1b) wird vernachlässigt, da er Anregungsprozesse höherer Ordnung beschreibt.

Für das gekoppelte Gleichungssystem erhalten wir dann:

$$\dot{C}_0(t) = - \int_{t_0}^t \varphi(t, t') C_0(t') dt' \quad (\text{III.3.2a})$$

$$C_m(t) = - \int_{t_0}^t C_0(t') V_{m0}(t') \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} \sigma_{m0}(t'') dt'' \right\} dt' \quad , \quad (\text{II.3.2b})$$

wobei wir die Anfangsbedingung $C_n(0) = \delta_{n0}$ und die Abkürzung

$$\varphi(t, t') = \sum_{m \neq 0} \left\{ V_{m0}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t \sigma_{m0}(t) dt\right) \right\}^* \left\{ V_{m0}(t') \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} \sigma_{m0}(t) dt\right) \right\} \quad (\text{III.3.3})$$

verwendet haben.

Betrachten wir t und t' als Zufallsvariable, so werden sich die Terme in Gleichung (III.3.3) für eine große Zahl von Zuständen zu Null addieren.

Mathematisch gesehen ist $\left\{ V_{m0}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t \sigma_{m0}(t) dt\right) \right\}$ eine Funktion der Zeit t , deren Vorzeichen sowohl bei einer Änderung von m als auch von t "zufällig" wechselt. Da t und t' kontinuierliche Variablen sind, wird $\varphi(t, t')$ nur in einem schmalen Bereich der $(t-t')$ -Ebene wesentlich von Null verschieden sein und dort für $t \approx t'$ ihr Maximum haben.

Deshalb nehmen wir an

$$\varphi(t, t') = \Gamma(t) \tilde{\varphi}(|\tau|) \quad (\text{III.3.4})$$

mit

$$\Gamma(t) = \sum_{m \neq 0} |V_{m0}(t)|^2 \quad \text{und} \quad \tau = t - t'.$$

Hier ist $\tilde{\varphi}(0) = 1$ und $\tilde{\varphi}(|\tau|)$ eine stark abfallende Funktion für wachsendes τ , so daß wir $\varphi(t, t')$ als Korrelationsfunktion interpretieren

können⁽⁴⁰⁾.

Wir definieren nun eine Korrelationszeit τ_c , die dadurch bestimmt sein soll, daß für $\tau = \tau_c$ die Funktion $\tilde{Q}(|\tau|)$ wesentlich kleiner ist als $\tilde{Q}(0)$, aber vergleichbar mit $\hat{Q}(0)$ und schreiben deshalb⁽⁴¹⁾:

$$\tilde{Q}(|\tau|) = \tilde{Q}(0) \exp\left\{-\frac{|\tau|}{\tau_c}\right\}. \quad (\text{III.3.5})$$

Setzen wir dies in Gleichung (III.3.2a) ein, so finden wir:

$$\dot{C}_0(t) = -\Gamma(t) \int_0^t C_0(t-\tau) \exp\left\{-\frac{|\tau|}{\tau_c}\right\} d\tau \quad (\text{III.3.6})$$

Da die Funktion $\exp\left\{-\frac{|\tau|}{\tau_c}\right\}$ um $\tau = 0$ gepeakt ist und τ_c im allgemeinen klein ist, können wir Gleichung (III.3.6) wie folgt umschreiben:

$$\begin{aligned} \dot{C}_0(t) &\approx -\Gamma(t) C_0(t) \int_0^t \exp\left\{-\frac{|\tau|}{\tau_c}\right\} d\tau \\ &= -\tau_c \Gamma(t) C_0(t) \left\{1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right)\right\} \end{aligned} \quad (\text{III.3.7})$$

Durch Integration erhalten wir:

$$C_0(t) \approx \exp\left[-\tau_c \int_0^t f(t) dt\right], \quad (\text{III.3.8})$$

mit

$$f(t) = \Gamma(t) \left\{1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right)\right\}.$$

Als Anfangsbedingung wählen wir $C_0(0) = 1$.

Wir erhalten nun die Amplituden $C_m(t)$, indem wir Gleichung (III.3.8) in Gleichung (III.3.2b) einsetzen. Die Konsistenz unseres Vorgehens läßt sich nun durch die numerische Berechnung der Funktion $\mathcal{Q}(t, t')$ überprüfen, indem wir ihr Verhalten als Funktion von τ studieren.

Um einen Ausdruck für die Charakteristische Zeit τ_c zu erhalten, schreiben wir $\mathcal{Q}(t, t')$ in folgender Form:

$$\mathcal{Q}(t, t') = \sum_{m \neq 0} \left| V_{m0}(t) \right| \left| V_{m0}(t-\tau) \right| \exp i \left\{ \mathcal{Q}_{m0}(t) - \mathcal{Q}_{m0}(t-\tau) \right\}, \quad (\text{III.3.9})$$

wobei $\mathcal{Q}_{m0}(t)$ die entsprechende Phase ist.

Die Zeitabhängigkeit der Matrixelemente $V_{m0}(t)$ können wir durch die Formel

$$V_{m0}(t-\tau) \approx \left[\exp\left(-\frac{\tau}{\Delta}\right) \right] \cdot \left| V_{m0}(t) \right| \quad (\text{III.3.10})$$

näherungsweise beschreiben, wobei die mittleren Breiten Δ der Matrixelemente $V_{m0}(t)$ numerisch bestimmt werden müssen.

Setzen wir Gleichung (III.3.10) in Gleichung (III.3.9) ein, erhalten wir einen ähnlichen Ausdruck wie in (III.3.6), da sich für $t \neq t'$ die verschiedenen Terme in der Summe auf Grund der Phasen zu Null addieren.

Die charakteristische Zeit τ_c wird durch die mittlere Breite des Matrixelements $|v_{m0}(t)|$ beschrieben.

Die obigen Annahmen scheinen wegen der komplizierten Beschaffenheit der Funktion $\mathcal{Q}(t, t')$ sinnvoll zu sein, obwohl wir ihre Richtigkeit nicht streng bewiesen haben.

Figur (11) zeigt uns das Verhalten der Funktion $\mathcal{Q}(t, t')$ für den U-U Stoß zu einer festen Zeit t , die einem Abstand der beiden Kerne von $R = 250$ fm entspricht, unter Berücksichtigung der Radialkopplung. Wir sehen, daß sich $\mathcal{Q}(t, t')$ wie eine Korrelationsfunktion verhält mit einem Maximum in der Nähe von $t = t'$.

Wenn wir jedoch höhere Zustände als in Kapitel III.2 verwendet mitnehmen, kann sich das in Figur (11) gezeigte "glatte" Verhalten ändern. Die mittlere Korrelationszeit entspricht der Breite der Kurve. Für eine Relativgeschwindigkeit der beiden Ionen $v=0.1c$ ergibt sich der Wert

$$\tau_c \simeq 0.97 \times 10^{-20} \text{ sec.}$$

Das bedeutet aber, daß die Zeit, in der das System stabil ist gegen "Zufall", selbst für einen Abstand von 250 fm kleiner, zumindest vergleichbar ist mit der Stoßzeit. Dies stimmt auch mit der Berechnung der Ionisationswahrscheinlichkeiten der $2p_{1/2}$ und $2s_{1/2}$ -Zustände⁽³¹⁾

überein, deren Werte vergleichbar mit Eins sind:

Auf dieser Basis können wir nun ein iteratives Verfahren entwickeln und die Übergangswahrscheinlichkeiten $C_m(t)$ genauer berechnen. Der zweite Term der Gleichung (III.3.1b) kann mit Hilfe der Gleichung (III.3.2b) und (III.3.8) berechnet werden. Wir erhalten dann neue Gleichungen für $C_m(t)$ und damit eine Möglichkeit, genauere Werte für $C_0(t)$ zu bestimmen.

III.4. Unitarität

Im folgenden wollen wir noch untersuchen, inwieweit unsere näherungsweise berechneten Amplituden $C_m(t)$ die Unitaritätsbeziehung erfüllen.

Für die exakten Amplituden gilt im allgemeinen:

$$|C_0(t)|^2 + \sum_{m \neq 0} |C_m(t)|^2 = 1 \quad (\text{III.4.1})$$

Im Rahmen unseres Verfahrens zur näherungsweisen Berechnung der $C_m(t)$ können wir schreiben:

$$\sum_{m \neq 0} |C_m(t)|^2 = \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' g(\tau, \tau') \quad (\text{III.4.2})$$

mit

$$g(\tau, \tau') = C_0^*(\tau) C_0(\tau') Q(\tau, \tau')$$

Unter Verwendung von (III.3.4) erhalten wir:

$$\begin{aligned} \sum_{m \neq 0} |C_m(t)|^2 &= \int_0^t d\tau \int_0^t [g(\tau, \tau') + g(\tau', \tau)] d\tau' \\ &\simeq 2 \tau_c \int_0^t d\tau |C_0(\tau)|^2 \Gamma(\tau) [1 - \exp(-\frac{\tau}{\tau_c})] \end{aligned} \quad (\text{III.4.3})$$

Der Integrand ist nach Gleichung (III.3.8) nichts anderes als die negative zeitliche Ableitung von

$$\begin{aligned} |C_0(t)|^2, \text{ so daß gilt:} \\ \sum_{m \neq 0} |C_m(t)|^2 = |C_0(0)|^2 - |C_0(t)|^2 = 1 - |C_0(t)|^2 \end{aligned} \quad (\text{III.4.4})$$

Das bedeutet aber, daß die von uns berechneten Amplituden die Unitaritätsbeziehung (III.4.1) erfüllen und somit unser Verfahren anwendbar ist auf viele interessante Probleme in der Atomphysik mit schweren Ionen.

IV. Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse

In dieser Arbeit haben wir den Einfluß der Corioliskopplung auf die relativistischen Matrixelemente und Bindungsenergien für das U-U System untersucht. Für die acht am stärksten gebundenen Molekülzustände $(1s_{\frac{1}{2}\sigma}, 2p_{\frac{1}{2}\sigma}, 2s_{\frac{1}{2}\sigma}, 2p_{\frac{3}{2}\sigma}, 2p_{\frac{3}{2}\pi}, 3p_{\frac{1}{2}\sigma}, 3s_{\frac{1}{2}\sigma}, 4s_{\frac{1}{2}\sigma})$ wurden radiale Matrixelemente und Rotationsmatrixelemente als Funktion des Abstandes R der beiden Kerne berechnet. Für einen Stoßparameter $b = 50$ fm wurde R zwischen 50 fm und 3000 fm gewählt; die untere Grenze erklärt sich aus der Tatsache, daß für $b \neq 0$ immer $R \geq b$ ist.

Um den Einfluß der Corioliskopplung auf die relativistischen Matrixelemente deutlich zu machen, wurden in den Figuren (2) - (10) ebenfalls die Matrixelemente ohne Corioliskopplung (falls vorhanden) eingezeichnet. Diese sind der Arbeit von Betz⁽³⁸⁾ entnommen und gestrichelt gezeichnet. Die durchgezogenen Kurven stellen Matrixelemente mit Corioliskopplung dar.

In Figur (2) sind die radialen Matrixelemente zwischen dem $1s_{\frac{1}{2}\sigma}$ Zustand und höheren $n s_{\frac{1}{2}\sigma}$ Zuständen. Wir sehen, daß die Corioliskopplung nur einen geringen Einfluß auf die Werte der $\frac{\partial}{\partial R}$ -Matrixelemente hat. Die radialen Matrixelemente zwischen benachbarten Zuständen $(1s_{\frac{1}{2}\sigma}, 2s_{\frac{1}{2}\sigma})$ bzw. $(2s_{\frac{1}{2}\sigma}, 3s_{\frac{1}{2}\sigma})$ sind etwa gleich groß und haben ihren größten Wert für $R = b$.

Betrachten wir dagegen in Figur (4) die radialen Matrixelemente zwischen verschiedenen $n P_{m\sigma}$ Zuständen wie $(2 P_{3/2\sigma}, 2 P_{1/2\sigma})$, $(3 P_{1/2\sigma}, 2 P_{1/2\sigma})$, $(3 P_{1/2\sigma}, 2 P_{3/2\sigma})$, so sehen wir, daß für kleinen Zweizentrenabstand R sich die Matrixelemente mit Corioliskopplung viel stärker von den Matrixelementen ohne Corioliskopplung unterscheiden. Bis 1000 fm beträgt die relative Abweichung etwa 15%, für $R > 1000$ fm ist sie wesentlich kleiner. Das bedeutet aber, daß wir die Corioliskopplung als Störung im Zweizentren-Dirac-Hamiltonoperator betrachten können.

In den Figuren (5) - (8) sind die in Gleichung (II.4.9) auftretenden durch R dividierten Matrixelemente $\langle \psi_m | \frac{\partial}{\partial R} - \frac{2\Omega}{R} \frac{\partial}{\partial \Omega} | \psi_n \rangle$, die aus Radial und Rotations-(Coriolis-) Anteil bestehen, zwischen verschiedenen molekularen Zuständen gezeichnet. Wir sehen, daß die Benutzung von Wellenfunktionen im rotierenden System nur einen geringen Einfluß hat. Im überschweren System U-U spielt die Rotationskopplung gegenüber der Radialkopplung nur eine untergeordnete Rolle.

Die einzige Ausnahme bilden die Matrixelemente zwischen den Zuständen $(2 P_{3/2\pi}, 2 P_{3/2\sigma})$ und $(3 P_{1/2\sigma}, 2 P_{3/2\pi})$ für $R < 500$ fm, auf die die Corioliskopplung einen großen Einfluß hat, wie in den Figuren (9) und (10) gezeigt ist. Hier sind die in Gleichung (II.4.9) auftretenden Matrixelemente berechnet worden und nicht

die durch R^* dividierten. Die radialen Matrixelemente sind für diese Zustände identisch Null.

Nachdem wir den Einfluß der Corioliskopplung auf die relativistischen Matrixelemente untersucht haben, wenden wir uns nun den Bindungsenergien zu. Figur (1) zeigt die Bindungsenergie der Elektronen im Feld zweier Urankerne als Funktion des Zentrenabstandes R im Bereich zwischen $R = 50$ fm und $R = 3000$ fm. Der Stoßparameter b beträgt hier $b = 50$ fm. Auf Grund der Zylindersymmetrie der Anordnung ist die Projektion m des Gesamtdrehimpulses $\vec{J}$ der Elektronen auf die Verbindungsachse der beiden Kerne eine gute Quantenzahl, außerdem haben die Zustände gute Parität, da das U-U System ein symmetrisches Molekül darstellt.

Die durchgezogenen Kurven sind mit Rotationskopplung, die gestrichelt gezeichneten ohne Rotationskopplung gerechnet. Zum Vergleich ist es nützlich, die Winkelgeschwindigkeit Ω durch den Stoßparameter b auszudrücken.

$$\Omega = \frac{v_{\infty} b}{R^2}$$

Wir sehen, wenn wir beide Korrelationsdiagramme vergleichen, daß der Einfluß der Rotation des Kern-Kern Systems auf die Bindungsenergien der Elektronen gering ist. Ihr Einfluß ist noch am größten für

einen mittleren Abstand R der beiden Kerne zwischen 300 fm und 2000fm.

In Figur (1) sehen wir auch eine Kreuzung zwischen dem $2S_{1/2}$ und $2P_{3/2}$ Zustand sowie zwischen dem $2S_{1/2}$ und $2P_{3/2}$ Zustand. Energieniveaus, die zu Zuständen gleicher Parität und gleicher magnetischer Quantenzahl m gehören, dürfen sich dagegen für symmetrische Systeme nicht kreuzen.

Neben der Corioliskopplung haben wir auch das dynamische Verhalten des Elektronensystems während eines U-U Stoßes untersucht. In unserer Rechnung nehmen wir an, daß zur Anfangszeit t_0 die Molekülzustände $1S_{1/2}$, $2P_{1/2}$ und $2S_{1/2}$ besetzt sind, während alle anderen $2P_{3/2}$, $3P_{1/2}$, $3S_{1/2}$ und $4S_{1/2}$ Zustände nicht besetzt sind. Nach Gleichung (III.2.4) besteht die Relaxationszeit der Elektronen aus zwei Termen: der erste Term τ_R beschreibt den Teil der Relaxationszeit, der von der Radialkopplung herrührt, der andere Term τ_W beschreibt die Relaxationszeit auf Grund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Die Wechselwirkungszeit ist gleich der Flugzeit des Projektils durch den Wechselwirkungsbereich; dieser wird als eine Kugel von Radius $R = 100$ fm angenommen
 $(\tau_{coll} \simeq 0.5 \times 10^{-19} \text{ sec}).$

Für eine Ionengeschwindigkeit von etwa einem Zehntel der Lichtgeschwindigkeit haben wir die

Relaxationszeiten τ_W und τ_R ausgerechnet und erhalten:

$$\tau_W = 0.8334 \times 10^{-18} \text{ sec.}$$

$$\tau_R = 0.3678 \times 10^{-20} \text{ sec.}$$

Wir finden, daß τ_W größer ist als τ_R und τ_{coll} zusammengenommen. Dies zeigt, daß wir die Elektron-Elektron-Wechselwirkung vernachlässigen können. Die Radialkopplung hingegen ist für die Verwendung der adiabatischen zeitabhängigen Störungstheorie sehr wichtig, die zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit $|C_m(t)|^2$ benötigt wird.

Die Energiebreite $(\Delta E)^2$ ist für den Anfangszustand $\phi_0(\vec{r}, \vec{R}(t))$ zur Zeit t_0 gegeben zu:

$$(\Delta E)^2 = \hbar(\tau)^{-2} = (\Delta E_R)^2 + (\Delta E_W)^2,$$

wobei ΔE_R die Energiebreite auf Grund der Radialkopplung und ΔE_W die Energiebreite auf Grund der Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist. Für ΔE_R und ΔE_W erhalten wir folgende Werte

$$\Delta E_R \simeq 180 \text{ KeV}$$

$$\Delta E_W \simeq 0.8 \text{ KeV}$$

und können somit ΔE_W in Bezug auf die gesamte Energiebreite vernachlässigen.

Der diagonale Teil der Wechselwirkung, der nur von der Elektron-Elektron-Wechselwirkung und nicht von der Zeitabhängigkeit herrührt, führt zu einer Verschiebung der Energien der adiabatischen Basiszustände, die etwa 10 Prozent für die Einteilchenenergien der inneren Schalen beträgt.

Der nicht diagonale Teil der Wechselwirkung dagegen verursacht eine Änderung in den Wellenfunktionen. Wir haben eine Relaxationszeit der Elektronen für diesen Prozess definiert. Der Vergleich zwischen der Relaxationszeit der Elektronen und typischen Stoßzeiten zeigt uns, ob wir die Wechselwirkung in die Basiszustände einschließen müssen, oder ob wir sie als Störung behandeln oder gar vernachlässigen können.

Schließlich haben wir eine Näherungsmethode zur Berechnung von Übergangswahrscheinlichkeiten durch näherungsweise Lösung der gekoppelten Differentialgleichungen angegeben und gezeigt, daß die so berechneten Amplituden die Unitaritätsbeziehung erfüllen. Diese Gleichungen können von Nutzen sein, wenn man den großen numerischen Aufwand für eine exakte Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen vermeiden will. Im Rahmen dieser Approximationsmethode wurde z.B. gezeigt, daß Prozesse höherer Ordnung bei der Ionisation des $1S_{\sigma}$ -Niveaus nicht vernachlässigt werden können (Rihan, Müller, Greiner).⁽⁴²⁾ Dieser Befund wird durch

die kürzlichen Rechnungen von G. Soff⁽⁴³⁾ et.al.,
die die gekoppelten Kanäle voll gelöst haben, in
eindrucksvoller Weise bestätigt.

V. Anhang

V.1. Berechnung der Relaxationszeit in der zweiten Quantisierung

Im folgenden setzen wir $Q = \tau^{-2}$

Aus Gleichung (III.1.5)

$$V_{m0}(t) = \langle \phi_m | \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{i}{\hbar} H(r, t) | \phi_0 \rangle \quad (1)$$

und

$$V_{m0}(t) = -V_{0m}^*(t)$$

folgt:

$$Q = \sum_{m \neq 0} |V_{m0}(t)|^2 \quad (2)$$

$$= - \sum_{m \neq 0} \left\{ \dot{R}^2 \langle \phi_0 | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_0 \rangle \right.$$

$$- \frac{1}{\hbar^2} \langle \phi_0 | H | \phi_m \rangle \langle \phi_m | H | \phi_0 \rangle$$

$$\left. - \frac{2}{\hbar} \operatorname{Im} \langle \phi_0 | \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | H | \phi_0 \rangle \right\} \quad (3)$$

Da die Operatoren in den Matrixelementen $\langle \phi_0 | \dot{R} \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m \rangle$ und $\langle \phi_m | H | \phi_0 \rangle$ reell und hermetisch sind, können wir Gleichung (3) umschreiben:

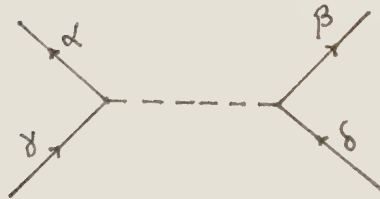
$$Q = \sum_{m \neq 0} \left\{ \frac{1}{R} \langle \phi_0 | \hat{H} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \hat{H} | \phi_0 \rangle - R^2 \langle \phi_0 | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_m \rangle \langle \phi_m | \frac{\partial}{\partial R} | \phi_0 \rangle \right\} \quad (4)$$

Wir definieren den Operator H' als Zweiteilchenoperator

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \frac{1}{2} \sum_{i < j} V_{ij} \begin{pmatrix} r_1 & r_2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} V_{\alpha\beta,\gamma\delta} a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta} \end{aligned} \quad (5)$$

mit

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= \langle \alpha\beta | V(r_1, r_2) | \gamma\delta \rangle \\ &= \iint \phi_{\alpha}^*(\tilde{r}_1) \phi_{\beta}^*(\tilde{r}_2) V(r_1, r_2) \phi_{\gamma}(\tilde{r}_1) \phi_{\delta}(\tilde{r}_2) d\tilde{r}_1 d\tilde{r}_2 \end{aligned} \quad (6)$$



Mit $a_{\beta}^{\dagger}$ und $a_{\alpha}^{\dagger}$ bezeichnen wir die besetzten Zustände, mit a_{γ} und a_{δ} die unbesetzten Zustände.

Für diese Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren gelten die Kommutationsrelationen

$$\left. \begin{aligned} \{a_{\beta}^{\dagger}, a_{\alpha}^{\dagger}\} &= \{a_{\gamma}, a_{\delta}\} = \\ \text{und} \quad \{a_{\beta}^{\dagger}, a_{\delta}\} &= \delta_{\beta\delta} \quad \neq \quad \{a_{\alpha}^{\dagger}, a_{\gamma}\} = \delta_{\alpha\gamma} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Berücksichtigen wir die Beziehungen (7), so können wir für die Gleichung (4) schreiben:

$$Q = \sum_{m \neq 0} \left\{ \frac{I_1}{\hbar^2} - R^2 I_2 \right\} \quad (8)$$

$$I_1 = \langle 0 | \hat{H} | m \rangle \langle m | \hat{H} | 0 \rangle$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{\alpha'\beta'\gamma'\delta'} \langle 0 | a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\gamma'} a_{\delta} | m \rangle \langle m | a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\gamma'} a_{\delta} | 0 \rangle *$$

$$V_{\alpha\beta,\gamma\delta} V_{\alpha'\beta',\gamma'\delta'} \quad (9)$$

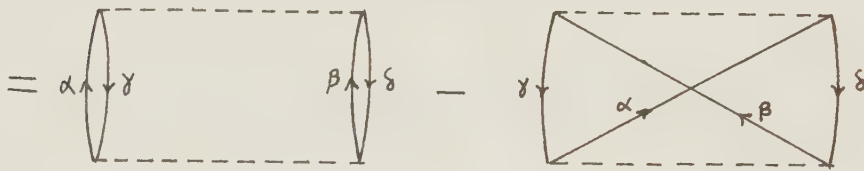
$$\text{Mit } |m\rangle = a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\gamma'} a_{\delta} | 0 \rangle \quad \text{folgt:} \quad (10)$$

$$I_1 = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{\alpha'\beta'\gamma'\delta'} V_{\alpha\beta,\gamma\delta} V_{\alpha'\beta',\gamma'\delta'} \langle 0 | a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\gamma'} a_{\delta} | a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\gamma'} a_{\delta} | 0 \rangle \quad (11)$$

Sind α und β die zur Zeit t_0 besetzten Molekülzustände, dann erhalten wir folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned}
& \langle 0 | a_{\beta'}^{\dagger} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta} | a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta} | 0 \rangle V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\alpha\beta, \gamma\delta} \\
&= V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\alpha\beta, \gamma\delta} [\delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\gamma\alpha} \delta_{\delta\beta} - \delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\gamma\beta} \delta_{\delta\alpha} - \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha\delta} \delta_{\gamma\alpha} \delta_{\delta\beta} + \delta_{\beta\gamma} \delta_{\alpha\delta} \delta_{\gamma\beta} \delta_{\delta\alpha}] \\
&= 2 \sum_{\alpha, \beta \notin F} \left[V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\gamma\delta, \alpha\beta} - V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\gamma\delta, \beta\alpha} \right] \quad (12)
\end{aligned}$$

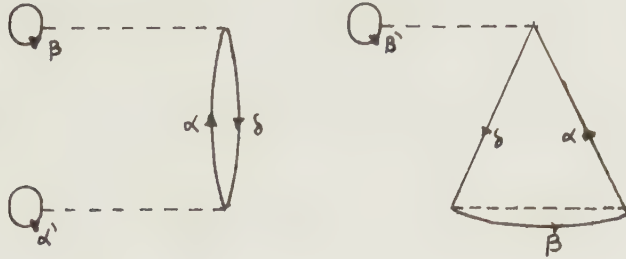
Diese Matrixelemente können wir auch in graphischer Form darstellen:



Ist nur α zur Teit t_0 besetzt, dann finden wir:

$$\begin{aligned}
& \langle 0 | a_{\beta'}^{\dagger} a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta} | a_{\beta}^{\dagger} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\gamma} a_{\delta} | 0 \rangle V_{\alpha'\beta', \gamma'\delta'} V_{\alpha\beta, \gamma\delta} \\
&= V_{\alpha'\beta', \gamma'\delta'} V_{\alpha\beta, \gamma\delta} [-\delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha'\gamma'} \delta_{\gamma'\alpha} \delta_{\delta\beta} + \delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha'\gamma'} \delta_{\gamma'\alpha} \delta_{\delta\beta} - \delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha'\gamma'} \delta_{\gamma'\alpha} \delta_{\delta\beta} + \delta_{\beta\delta} \delta_{\alpha'\gamma'} \delta_{\gamma'\alpha} \delta_{\delta\beta}] \\
&= 2 \sum_{\alpha \notin F} \left[V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\gamma\delta, \alpha\beta} - V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\gamma\delta, \beta\alpha} \right] \quad (13)
\end{aligned}$$

ebenfalls in graphischer Form:



Mit den Gleichungen (11,12,13) ergibt sich

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \frac{1}{4} \left[\sum_{\alpha, \beta \notin F} \left\{ V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\gamma\delta, \alpha\beta} - V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\gamma\delta, \beta\alpha} \right\} \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{\alpha \notin F} \left\{ V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\gamma\delta, \alpha\beta} - V_{\alpha\beta, \gamma\delta} V_{\gamma\delta, \alpha\delta} \right\} \right] \\
 &= \frac{1}{4} \left[\sum_{\alpha, \beta \notin F} V_{\alpha\beta, \gamma\delta} \tilde{V}_{\gamma\delta, \alpha\beta} + \sum_{\alpha \notin F} V_{\alpha\beta, \gamma\delta} \tilde{V}_{\gamma\delta, \alpha\delta} \right] \quad (14)
 \end{aligned}$$

wobei $\tilde{V}_{ij,kl}$ die Austauscheffekte enthält:

$$\tilde{V}_{ij,kl} = V_{ij,kl} - V_{ij,lk} \quad (15)$$

Für den Einteilchenoperator $\frac{\partial}{\partial R}$ haben wir folgende Definition:

$$\frac{\partial}{\partial R} = \sum_{\alpha \neq \beta} \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \beta \rangle a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} \quad (16)$$

Für die in Gleichung (8) auftretende Größe I_2 gilt:

$$I_2 = \sum_{m \neq 0} \langle 0 | \frac{\partial}{\partial R} | m \rangle \langle m | \frac{\partial}{\partial R} | 0 \rangle \quad (17)$$

Setzen wir Gleichung (16) in Gleichung (17) ein, dann bekommen wir:

$$\begin{aligned} I_2 &= \sum_{\alpha \neq \beta} \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \beta \rangle \langle \alpha' | \frac{\partial}{\partial R} | \beta' \rangle \langle 0 | a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} | a_{\alpha'}^{\dagger} a_{\beta'} | 0 \rangle \\ &= \sum_{\alpha \neq \beta} \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \beta \rangle \langle \alpha' | \frac{\partial}{\partial R} | \beta' \rangle \delta_{\beta \alpha'} \delta_{\alpha \beta'} \\ &= \sum_{\alpha \neq \beta} \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \beta \rangle \langle \beta | \frac{\partial}{\partial R} | \alpha \rangle = - \sum_{\alpha \neq \beta} \left| \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \beta \rangle \right|^2 \quad (18) \end{aligned}$$

Setzen wir nun die Gleichungen (15,18) in Gleichung (10) ein, erhalten wir schließlich:

$$\begin{aligned} Q &= \left[\dot{R}^2 \sum_{\alpha \neq \beta} \left| \langle \alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \beta \rangle \right|^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\hbar^2} \left\{ \sum_{\alpha, \beta \neq \gamma} V_{\alpha\beta, \gamma\gamma} \tilde{V}_{\gamma\gamma, \alpha\beta} + \sum_{\alpha \neq \beta} V_{\alpha\beta, \gamma\gamma} \tilde{V}_{\gamma\gamma, \gamma\alpha} \right\} \right]_{t=t_0} \end{aligned}$$

V.2. Berechnung der Matrixelemente $V_{\alpha\beta,\gamma\delta}$

Das Matrixelement $V_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ läßt sich schreiben als

$$V_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \langle \phi_\alpha | F_{\beta\delta}(r_1, r_2) | \phi_\gamma \rangle \quad (1)$$

mit

$$F_{\beta\delta}(r_1, r_2) = \langle \phi_\beta | \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} | \phi_\delta \rangle \quad (2)$$

$\frac{e^2}{|r_1 - r_2|}$ wird nach Kugelfunktionen entwickelt:

$$\frac{e^2}{|r_1 - r_2|} = e^2 \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \frac{4\pi}{2L+1} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{r_1^L}{r_2^{L+1}} & r_1 < r_2 \\ \frac{r_2^L}{r_1^{L+1}} & r_1 > r_2 \end{array} \right\} Y_{LM}^*(r_1) Y_{LM}(r_2) \quad (3)$$

$$V_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \iint \phi_\alpha^*(r_1) \phi_\beta^*(r_2) \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \phi_\gamma(r_1) \phi_\delta(r_2) d\tilde{r}_1 d\tilde{r}_2 \quad (4.a)$$

$$= 4\pi e^2 \sum_{L,M} \frac{1}{2L+1} [I_1 + I_2] \quad (4.b)$$

wobei

$$I_n = \int \phi_\beta^*(r_2) F_n(\tilde{r}_2) Y_{LM}(\tilde{r}_2) \phi_\delta(r_2) d\tilde{r}_2 \quad (n=1,2). \quad (5)$$

Dabei sind $F_1(\tilde{r}_2)$ und $F_2(\tilde{r}_2)$ definiert als

$$F_1(\tilde{r}_2) = \frac{1}{r_2^{L+1}} \iint_{r_2} \phi_\alpha^*(r_1) r_1^L Y_{LM}(\tilde{r}_1) \phi_\gamma(r_1) r_1^2 dr_1 d\Omega_1 \quad (6.a)$$

$$F_2(\tilde{r}_2) = r_2^L \iint_{r_1} \phi_\alpha^*(r_1) \frac{1}{r_1^{L+1}} Y_{LM}(\tilde{r}_1) \phi_\gamma(r_1) r_1^2 dr_1 d\Omega_1 \quad (6.b)$$

Es sei

$$|\phi_\gamma(r)\rangle = \sum_{\bar{K}} \begin{pmatrix} g_{\bar{K}}(r) & \chi_{\bar{K}}^{\bar{\mu}} \\ i f_{\bar{K}}(r) & \chi_{-\bar{K}}^{\bar{\mu}} \end{pmatrix} \quad (7)$$

$$\langle \phi_\alpha(r) | = \sum_K \left(G_K(r) \chi_K^{\mu\dagger} \quad -i F_K(r) \chi_{-K}^{\mu\dagger} \right) \quad (8)$$

mit

$$\chi_K^\mu = \sum_m \left(\ell, \mu-m, \frac{1}{2} m \mid j, \mu \right) Y_{\ell, \mu-m}(\tilde{r}) \chi^\mu.$$

$K, \bar{K}$ sind die Drehimpulse.

$\mu, \bar{\mu}$ sind die magnetischen Quantenzahlen.

Es gilt:

$$K = \begin{cases} \ell & \text{für } j_K = \ell - \frac{1}{2} \\ -\ell - 1 & \text{für } j_K = \ell + \frac{1}{2} \end{cases}$$

Setzen wir die Gleichungen (7,8) in Gleichung (6.a),
dann erhalten wir:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_1(\tilde{r}_2) = & \frac{1}{r_2^{L+1}} \sum_{k, \bar{k}} \sum_m \left[\int_0^{r_2} \int (\ell_k \mu - m, \frac{1}{2} m | j_k \mu) (\ell_{\bar{k}} \bar{\mu} - \bar{m}, \frac{1}{2} \bar{m} | j_{\bar{k}} \bar{\mu}) * \right. \\ & Y_{\ell_k \mu - m}^*(\tilde{r}_1) Y_{LM}^*(\tilde{r}_1) Y_{\ell_{\bar{k}} \bar{\mu} - \bar{m}}(\tilde{r}_1) r_1^{L+2} G_k(r_1) g_{\bar{k}}(r_1) \chi^{m+} \chi^{\bar{m}} dr_1 d\Omega_1 \\ & \left. + \int_0^{r_2} \int (\ell_k \mu - m, \frac{1}{2} m | j_{-k} \mu) (\ell_{\bar{k}} \bar{\mu} - \bar{m}, \frac{1}{2} \bar{m} | j_{-\bar{k}} \bar{\mu}) * \right. \\ & \left. Y_{\ell_k \mu - m}^*(\tilde{r}_1) Y_{LM}^*(\tilde{r}_1) Y_{\ell_{\bar{k}} \bar{\mu} - \bar{m}}(\tilde{r}_1) r_1^{L+2} F_k(r_1) f_{\bar{k}}(r_1) \chi^{m+} \chi^{\bar{m}} dr_1 d\Omega_1 \right] (9) \end{aligned}$$

Berücksichtigen wir folgende Beziehungen:

$$Y_{LM}^*(\tilde{r}) = (-1)^{-M} Y_{L-M}(\tilde{r}) \quad (10.a)$$

$$\chi^{m+} \chi^{\bar{m}} = \delta_{m\bar{m}} \quad (10.b)$$

$$\int Y_{\ell_1 m_1}(\tilde{r}) Y_{\ell_2 m_2}(\tilde{r}) Y_{\ell_3 m_3}(\tilde{r}) d\Omega = \left[\frac{(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)(2\ell_3+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (10.c)$$

$$C(k) = \begin{pmatrix} \ell & \mu-m, \frac{1}{2} & m \\ k & & k \end{pmatrix} \quad (10.d)$$

und setzen wir die Gleichungen (10.a, 10.b, 10.c, 10.d) in (9) ein, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} F_1(\tilde{r}_2) = \frac{1}{r_2^{L+1}} \sum_{k, \bar{k}} \frac{(2L+1)}{4\pi} \left[X(k, \bar{k}) \int_0^{r_2} r_1^{L+2} G_k(r_1) g_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right. \\ \left. + X(-k, -\bar{k}) \int_0^{r_2} r_1^{L+2} F_k(r_1) f_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right] \end{aligned} \quad (11)$$

mit

$$X(k, \bar{k}) = \sum_m (-1)^{m-M-\mu} C(k) C(\bar{k}) \left[\frac{4\pi(2\ell_k+1)(2\ell_{\bar{k}}+1)}{(2L+1)} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} \ell_k & L & \ell_{\bar{k}} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_k & L & \ell_{\bar{k}} \\ m-\mu & M & \bar{\mu}-m \end{pmatrix}$$

Analog erhalten wir für $F_2(\tilde{r}_2)$:

$$\begin{aligned} F_2(\tilde{r}_2) = r_2^L \sum_{k, \bar{k}} \frac{(2L+1)}{4\pi} \left[X(k, \bar{k}) \int_{r_2}^{\infty} r_1^{1-L} G_k(r_1) g_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right. \\ \left. + X(-k, -\bar{k}) \int_{r_2}^{\infty} r_1^{1-L} F_k(r_1) f_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right] \end{aligned} \quad (12)$$

Setzen wir die Gleichungen (11,12) in Gleichung (4) ein, so finden wir:

$$\begin{aligned}
 V_{\alpha\beta,\gamma\delta} = e^2 \sum_{L,M} \sum_{K,\bar{K}} \left[\int_0^\infty \int \phi_\beta^* (\tilde{r}_2) \frac{1}{r_2^{L+1}} \left\{ \chi(K,\bar{K}) \int_0^{r_2} r_1^{L+2} G_K(r_1) g_{\bar{K}}(r_1) dr_1 \right. \right. \\
 \left. \left. + \chi(-K,-\bar{K}) \int_0^{r_2} r_1^{L+2} F_K(r_1) f_{\bar{K}}(r_1) dr_1 \right\} \sum_{LM} Y_{LM}(\tilde{r}_2) \phi_\delta(\tilde{r}_2) r_2^2 dr_2 d\Omega_2 \right. \\
 \left. + \int_0^\infty \int \phi_\beta^* (\tilde{r}_2) r_2^L \left\{ \chi(K,\bar{K}) \int_{r_2}^\infty r_1^{1-L} G_K(r_1) g_{\bar{K}}(r_1) dr_1 \right. \right. \\
 \left. \left. + \chi(-K,-\bar{K}) \int_{r_2}^\infty r_1^{1-L} F_K(r_1) f_{\bar{K}}(r_1) dr_1 \right\} \sum_{LM} Y_{LM}(\tilde{r}_2) \phi_\delta(\tilde{r}_2) r_2^2 dr_2 d\Omega_2 \right]
 \end{aligned}
 \tag{13}$$

Es sei

$$\langle \phi_\beta | = \sum_{\lambda} \left(U_{\lambda}(r) \chi_{\lambda}^{\nu^+} - i V_{\lambda}(r) \chi_{-\lambda}^{\nu^+} \right)
 \tag{14}$$

$$| \phi_\delta \rangle = \sum_{\bar{\lambda}} \begin{pmatrix} u_{\bar{\lambda}}(r) \chi_{\bar{\lambda}}^{\bar{\nu}} \\ i v_{\bar{\lambda}}(r) \chi_{-\bar{\lambda}}^{\bar{\nu}} \end{pmatrix}
 \tag{15}$$

$\lambda, \bar{\lambda}$ sind die Drehimpulse.

$\nu, \bar{\nu}$ sind die magnetischen Quantenzahlen.

Setzen wir die Gleichungen (14,15) in (13) ein, erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 V_{\alpha\beta,\gamma\delta} = e^2 \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \sum_{k,\bar{k}} \sum_{\lambda,\bar{\lambda}} & \left[X(\lambda,\bar{\lambda}) \left[\int_0^{\infty} r_2^{1-L} U_{\lambda}(r_2) u_{\bar{\lambda}}(r_2) dr_2 \int_0^{r_2} r_1^{L+2} G_k(r_1) g_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right. \right. \\
 & + \int_0^{\infty} r_2^{L+2} U_{\lambda}(r_2) u_{\bar{\lambda}}(r_2) dr_2 \int_{r_2}^{\infty} r_1^{1-L} G_k(r_1) g_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \left. \right\} X(k,\bar{k}) \\
 & + \left\{ \int_0^{\infty} r_2^{1-L} U_{\lambda}(r_2) u_{\bar{\lambda}}(r_2) dr_2 \int_0^{r_2} r_1^{L+2} F_k(r_1) f_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right. \\
 & + \left. \int_0^{\infty} r_2^{L+2} U_{\lambda}(r_2) u_{\bar{\lambda}}(r_2) dr_2 \int_{r_2}^{\infty} r_1^{1-L} F_k(r_1) f_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right\} X(-k,-\bar{k}) \left. \right] \\
 & + X(-\lambda,-\bar{\lambda}) \left[\int_0^{\infty} r_2^{1-L} V_{\lambda}(r_2) v_{\bar{\lambda}}(r_2) dr_2 \int_0^{r_2} r_1^{L+2} G_k(r_1) g_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right. \\
 & + \int_0^{\infty} r_2^{L+2} V_{\lambda}(r_2) v_{\bar{\lambda}}(r_2) dr_2 \int_{r_2}^{\infty} r_1^{1-L} G_k(r_1) g_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \left. \right\} X(k,\bar{k}) \\
 & + \left\{ \int_0^{\infty} r_2^{1-L} V_{\lambda}(r_2) v_{\bar{\lambda}}(r_2) dr_2 \int_0^{r_2} r_1^{L+2} F_k(r_1) f_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right. \\
 & + \left. \int_0^{\infty} r_2^{L+2} V_{\lambda}(r_2) v_{\bar{\lambda}}(r_2) dr_2 \int_{r_2}^{\infty} r_1^{1-L} F_k(r_1) f_{\bar{k}}(r_1) dr_1 \right\} X(-k,-\bar{k}) \left. \right] \quad (16)
 \end{aligned}$$

Da wir die Funktionswerte der Radialwellenfunktion an den Stützstellen nur numerisch bestimmen können, müssen wir auch die Matrixelemente $V_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ numerisch berechnen, indem wir die Integration durch Summation ersetzen.

Literaturverzeichnis

- (1) M. Born und R. Oppenheimer, Ann d. Phys 84,457 (1927)
- (2) W. Heitler und F. London, Z. Physik 44,455 (1927)
- (3) F. Hund, Z. Physik 40,742 (1927)
- (4) O. Burrau, K. Danoke Vidensk. Selsk Mat-Fys.
Meddr.7 NO14 (1927)
- (5) R.S. Mulliken, Phys.Rev 32,186 (1928)
- (6) R.M. Morse und E.C.G. Stueckelberg, Phys.Rev 33,
932 (1929)
- (7) E. Teller, Z. Physik 61,458 (1930)
- (8) E.A. Hylleraas, Z. Physik 71,739 (1931)
- (9) G. Jaffé, Z. Physik 87,535 (1934)
- (10) D.R. Bates und G.W. Griffing, Proc.Phys.Soc. A66,
961 (1953)
- (11) D.R. Bates, K. Ledeham und A.L. Stewart, Phil.
Trans.R.Soc. A246,215 (1953)
- (12) D.R. Bates und T.R. Carson, Proc.R.Soc A234,207
(1956)
- (13) S.S. Gershtein und V.D. Krivchenkov, Sov.Phys.
JETP13,1044 (1961)
- (14) L.Y. Wilson und G.A. Gallup, J.chem.Phys.,
586 (1966)
- (15) K. Helfrich und H. Hartmann, Theor.chim.Acta
16,263 (1970)
- (16) S.K. Luke, J.chem.Phys 50, 1644 (1969)
- (17) B. Müller, Dissertation, Institut für theoretische

- Physik der Universität Frankfurt/M (1973),
 B. Müller und W. Greiner, Z. Naturforschung
 319 (1976)
- (18) J. Rafelski und B. Müller, Phys.Rev.Lett. 36,
 517 (1976)
- (19) J. Eisenberg und W. Greiner, Nuclear theory,
 Vol2, S.214 Amsterdam (1970)
- (20) B. Müller, J. Rafelski und W. Greiner, Z.Physik
 257, 62 und 183 (1972)
- (21) R.K. Smith, B. Müller und W. Greiner, J.Phys.B.
 Atom Molec Phys 8 No.1 (1975)
- (22) G. Heiligenthal, Diplomarbeit, Institut für
 theoretische Physik der Universität Frankfurt/M
 (1974)
- (23) J.Y. Park, W. Scheid und W. Greiner, Phys.Rev.
 C6, 1565 (1972)
- (24) J.S. Briggs, Rep. Prog.Phys. 39,218 (1976)
- (25) E. M. Rose, Relativistische Elektronentheorie
 I,II, Bibliographisches Institut Mannheim (1971)
- (26) A.S. Dawydow, Quantenmechanik, VEB Deutscher Ver-
 lag der Wissenschaften, Berlin (1967)
- (27) M. Barat und W. Lichten, Phys.Rev. A6, 211 (1972)
- (28) J.V. Neumann und E. Wigner, Phys.Z. 30,467 (1929)
- (29) U. Fano und W. Lichten, Phys.Rev.Lett 14,627
 (1965)
- (30) L.I. Ponomarev und T.P. Puzynina, J.theor.Phys.
 USSR 52,1273 (1967). (Sov.Phys. JETP 25,846 (1967)).

- (31) W. Betz, G. Heiligenthal, B. Müller, V. Oberacker, J. Reinhard, W. Schäfer, G. Soff und W. Greiner, Proceedings of the XIth International School on nuclear physics, Predeal Romania (1976)
- (32) G. Soff, Dissertation, Institut für theoretische Physik der Universität Frankfurt/M (1976)
- (33) G. Heiligenthal, Dissertation, Institut für theoretische Physik der Universität Frankfurt/M (1978)
- (34) D.R. Bates und R.Mc Carroll, Proc.Roy.Soc A245, 175 (1958)
- (35) W. Betz, Diplomarbeit, Institut für theoretische Physik der Universität Frankfurt/M (1976)
- (36) E.R. Davison, P.116 in Physical Chemistrie, An Adranced Treatise, Volume III, Edited by D. Henderson, Academic Press New York, London (1969)
- (37) J.S. Greenberg, C.K. Davis, B. Müller und W.Greiner, Int Conf. on Reactions between Complex Nuclei, Nashville Tenn (1974)
- (38) J. Reinhard und W. Greiner, Rep. Prog. Phys.40, 219 (1977)
- (39) W. Greiner und W. Scheid; to appear in Heavy ion Physics ed by Back North Holland Publ. Comp (1977)
- (40) V.M. Strutinsky, Z.Physik 280A,99 (1977)

- (41) M.C. Wang und G.E. Uhlenbeck, Rev. Modernphys
17,323 (1945)
- (42) T. Rihan, B. Müller und W. Greiner, J.Phys.B:
Atom.Molec.Phys., 12 Nr.5 (1979)
- (43) G. Soff, W. Betz, G. Heiligenthal, J. Kirsch,
B. Müller und J. Reinhardt, Fisika 9 Suppl.4
(1977)
- (44) W. Betz, Dissertation, Institut für theoretische
Physik der Universität Frankfurt/M (1979)

Figurenbeschreibung

- Figur 1: Bindungsenergie der Elektronen im Feld zweier Urkerne als Funktion des Zentrenabstandes R im Bereich zwischen $R = 50$ fm und $R = 3000$ fm. Der Stoßparameter $b = 50$ fm. Die durchgezogenen Kurven sind mit Corioliskopplung, die strichelt gezeichneten ohne Corioliskopplung gerechnet.
- Figur 2,3: Relativistische Radialmatrixelemente der $1S_\sigma$, $2S_\sigma$, $3S_\sigma$, $4S_\sigma$ Zustände des U-U Systems. Die durchgezogenen Kurven sind mit Corioliskopplung, die gestrichelt gezeichneten ohne Corioliskopplung gerechnet.
- Figur 4: Relativistische Radialmatrixelemente der $2P_{1/2\sigma}$, $2P_{3/2\sigma}$, $3P_{1/2\sigma}$ Zustände des U-U Systems mit und ohne Corioliskopplung (falls vorhanden).
- Figur 5,6: Relativistische $(\frac{\partial}{\partial R} - \frac{2\Omega}{R} \frac{\partial}{\partial \Omega})$ - Matrixelemente der ersten vier S-Zustände des U-U Systems mit und ohne Corioliskopplung.
- Figur 7,8: Relativistische $(\frac{\partial}{\partial R} - \frac{2\Omega}{R} \frac{\partial}{\partial \Omega})$ - Matrixelemente der $2P_{1/2\sigma}$, $2P_{3/2\sigma}$, $2P_{3/2\pi}$ und $3P_{1/2\sigma}$ Zustände des U-U Systems mit und ohne Rotationskopplung (falls vorhanden).

Figur 9,10: Vergleich zwischen den relativistischen $(\dot{R} \frac{\partial}{\partial R} + \dot{\Omega} \frac{\partial}{\partial \Omega})$ - Matrixelementen mit Corioliskopplung und den Rotationsmatrixelementen zwischen $(2P_{3/2 \pi}, 2P_{3/2 \sigma})$ - Zuständen bzw. $(3P_{1/2 \sigma}, 2P_{3/2 \pi})$ - Zuständen.

Figur 11: Korrelationsfunktion $\phi(t, t')$ für Radialkopplung im U-U Stoß zur festen Zeit t , die einem Abstand $R = 250$ fm entspricht. $(R-R')$ entspricht $(t-t')$ und λ_e ist die Comptonwellenlänge des Elektrons.

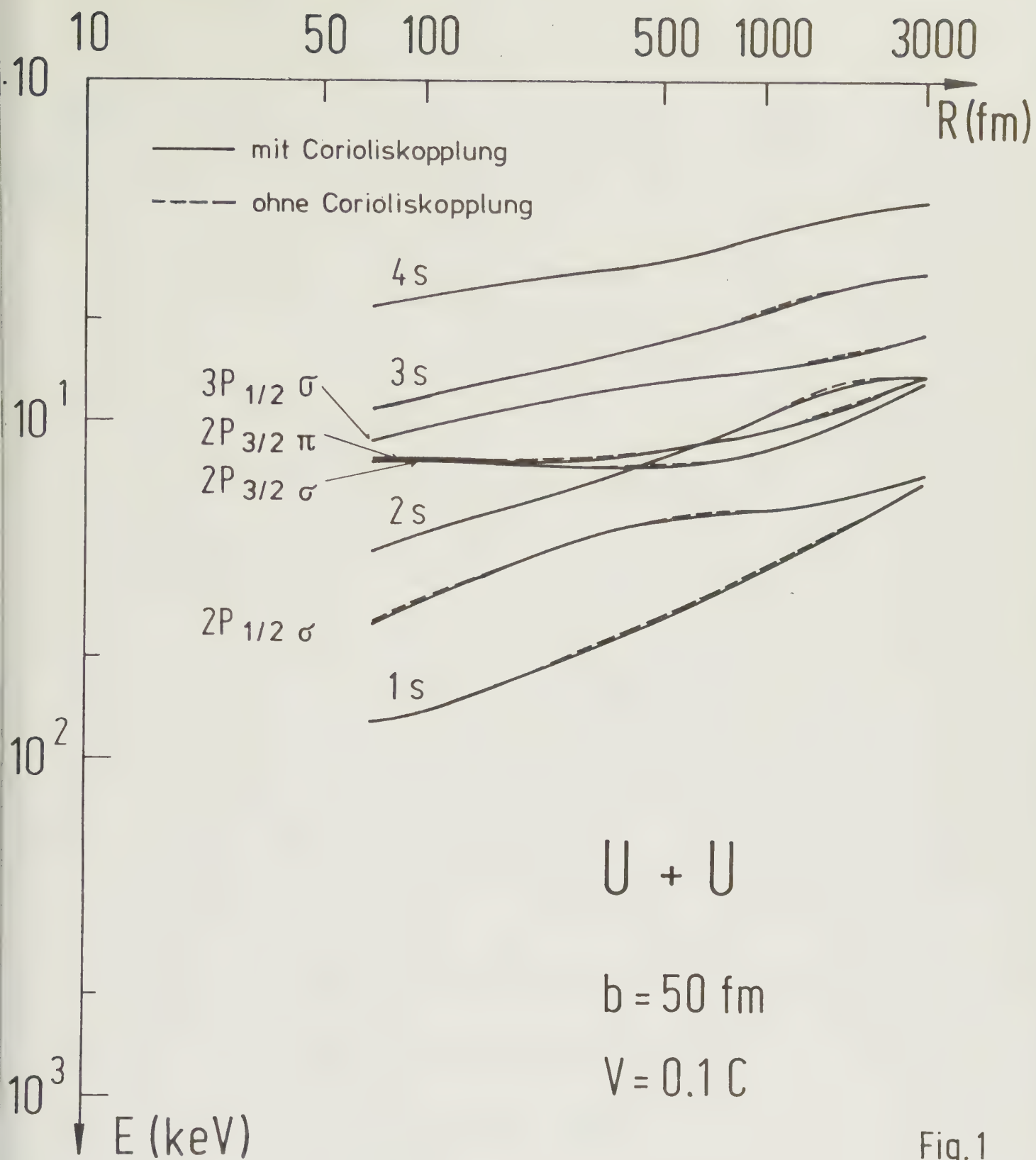


Fig.1

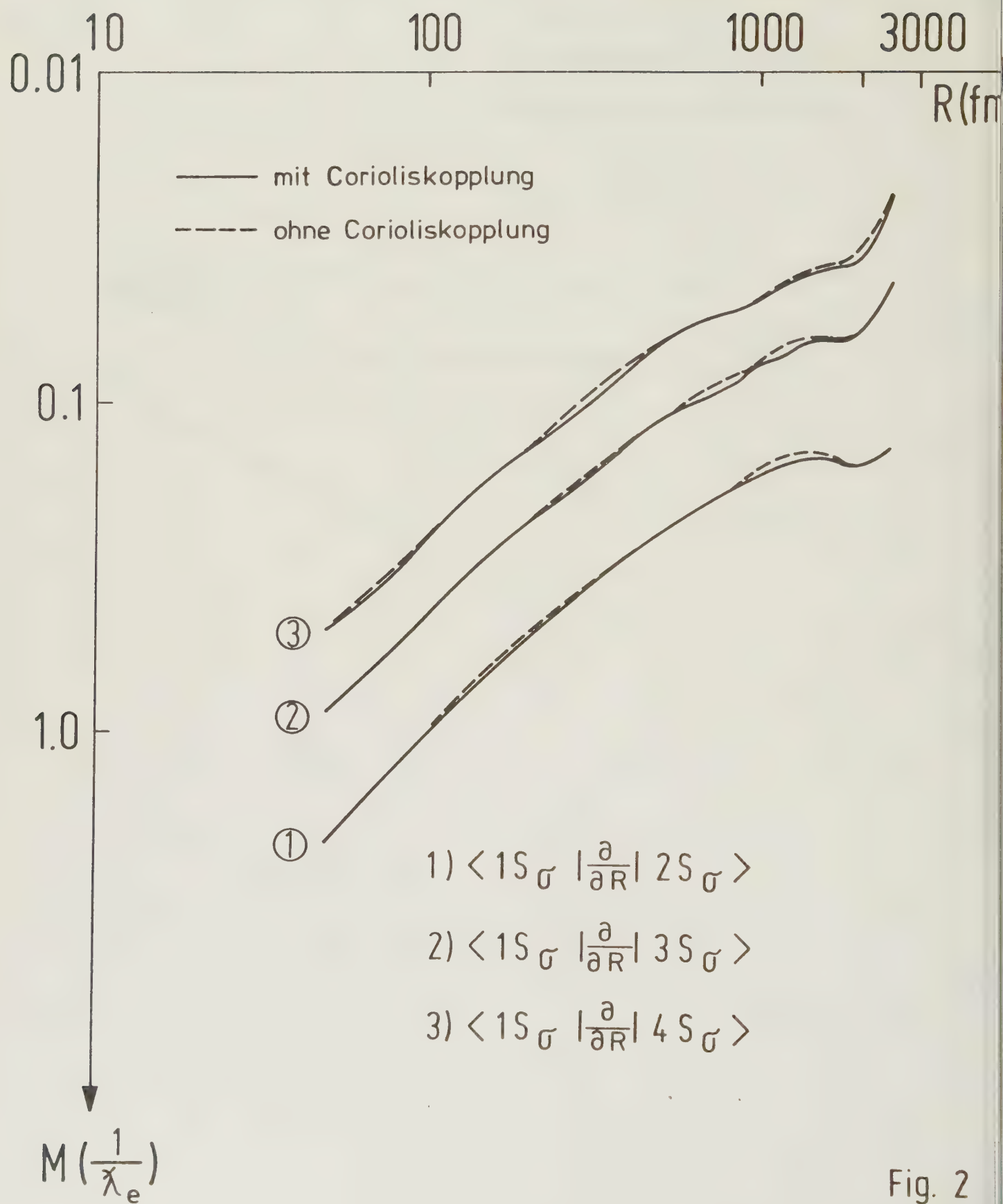


Fig. 2

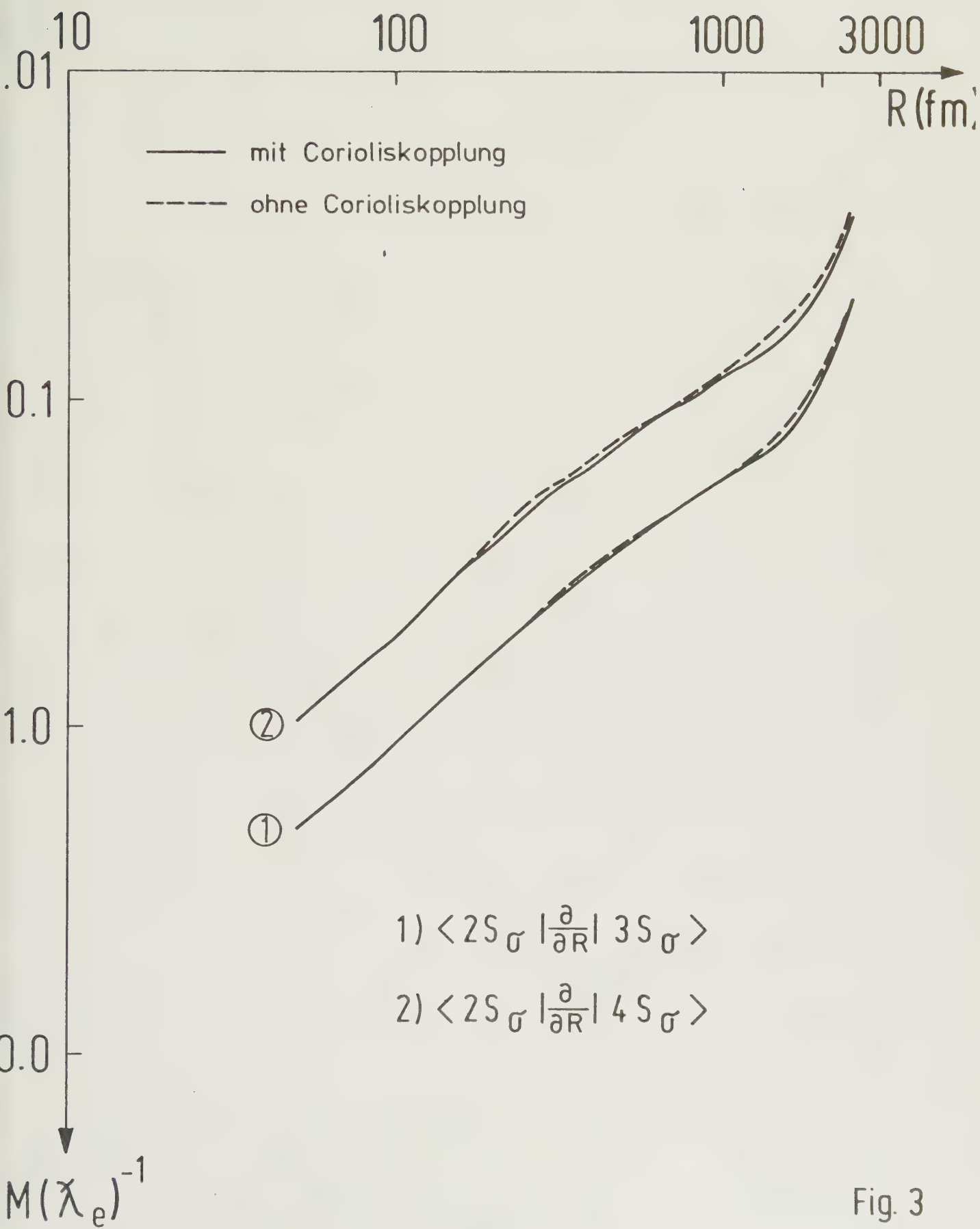


Fig. 3

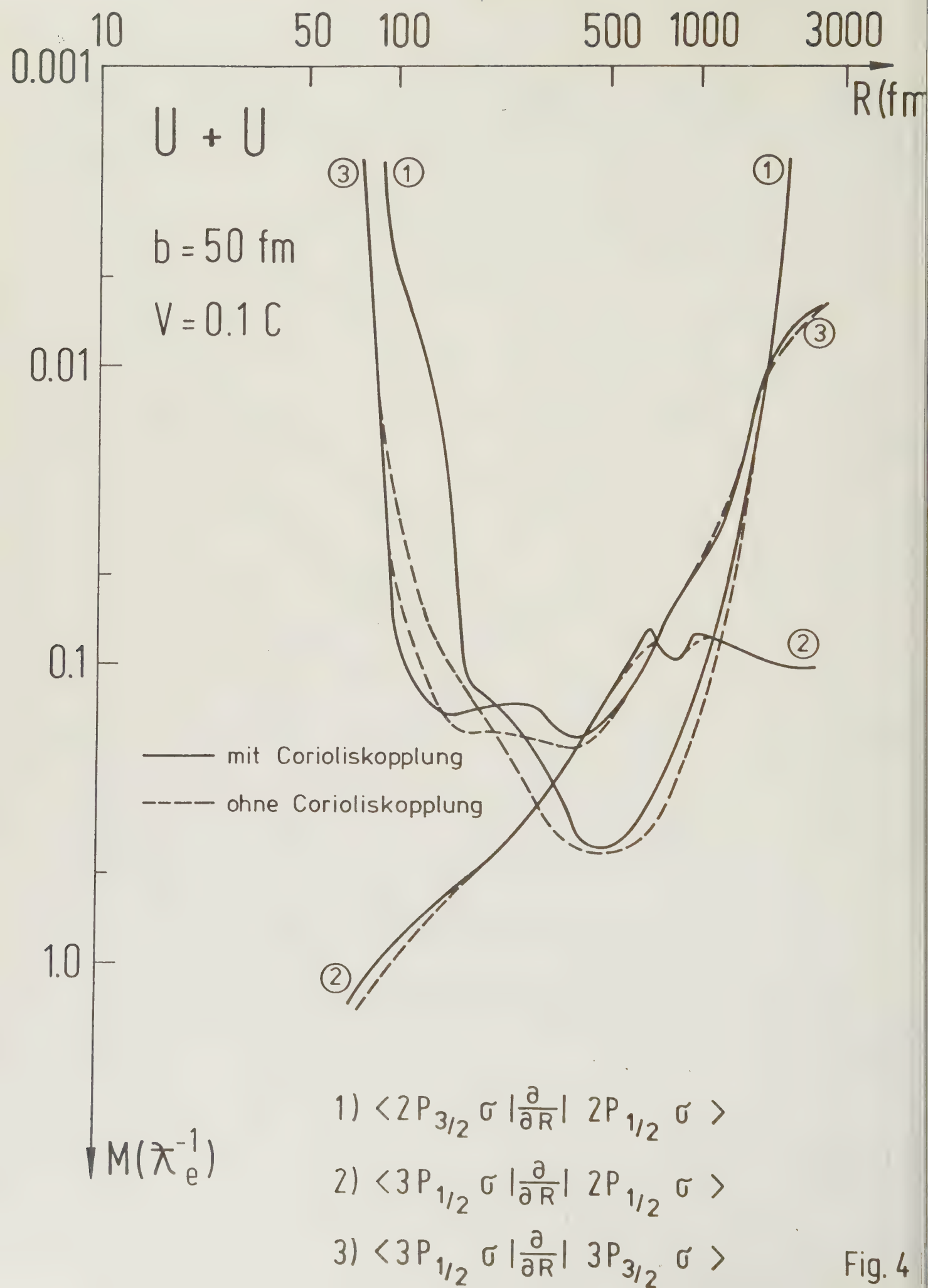


Fig. 4

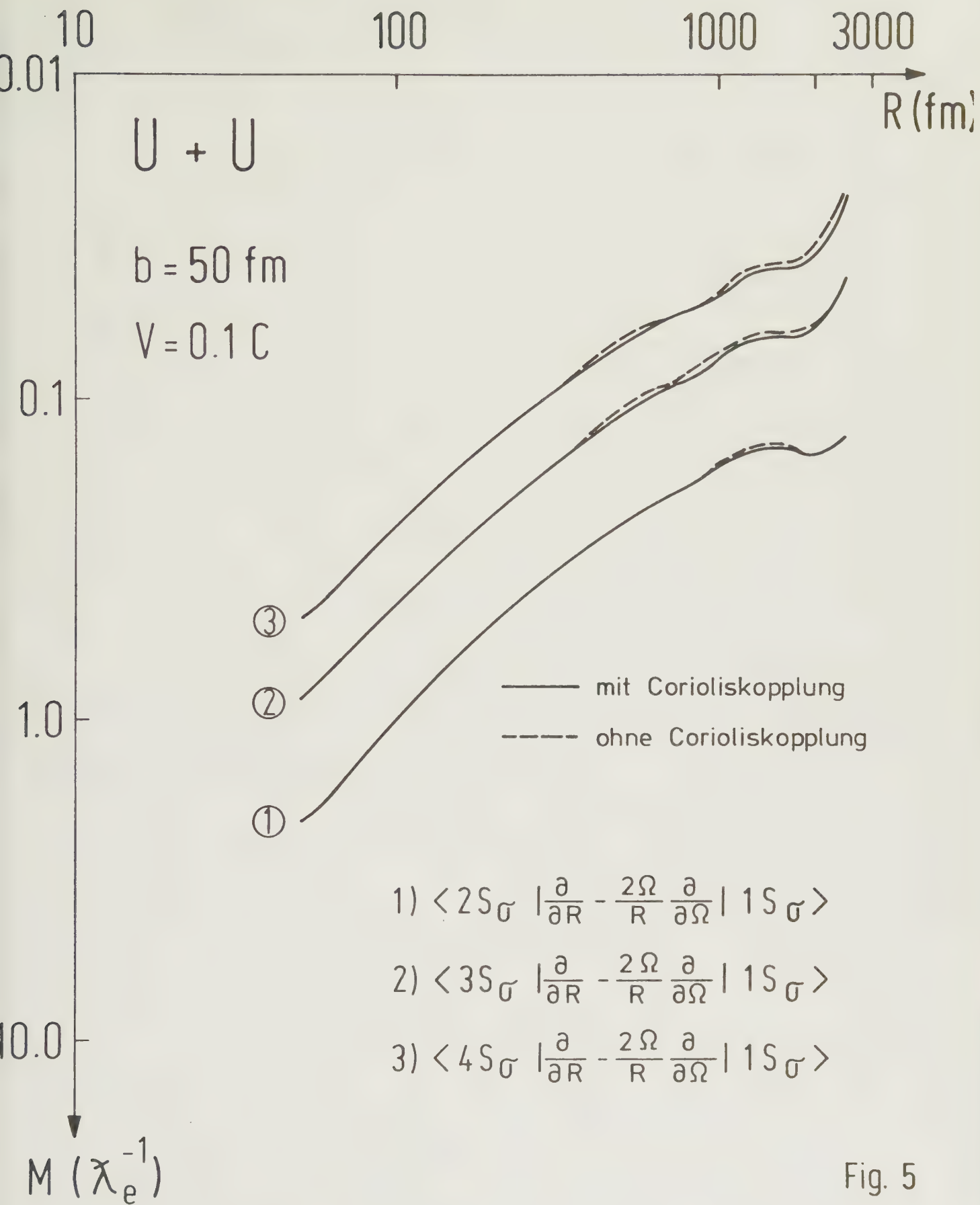


Fig. 5

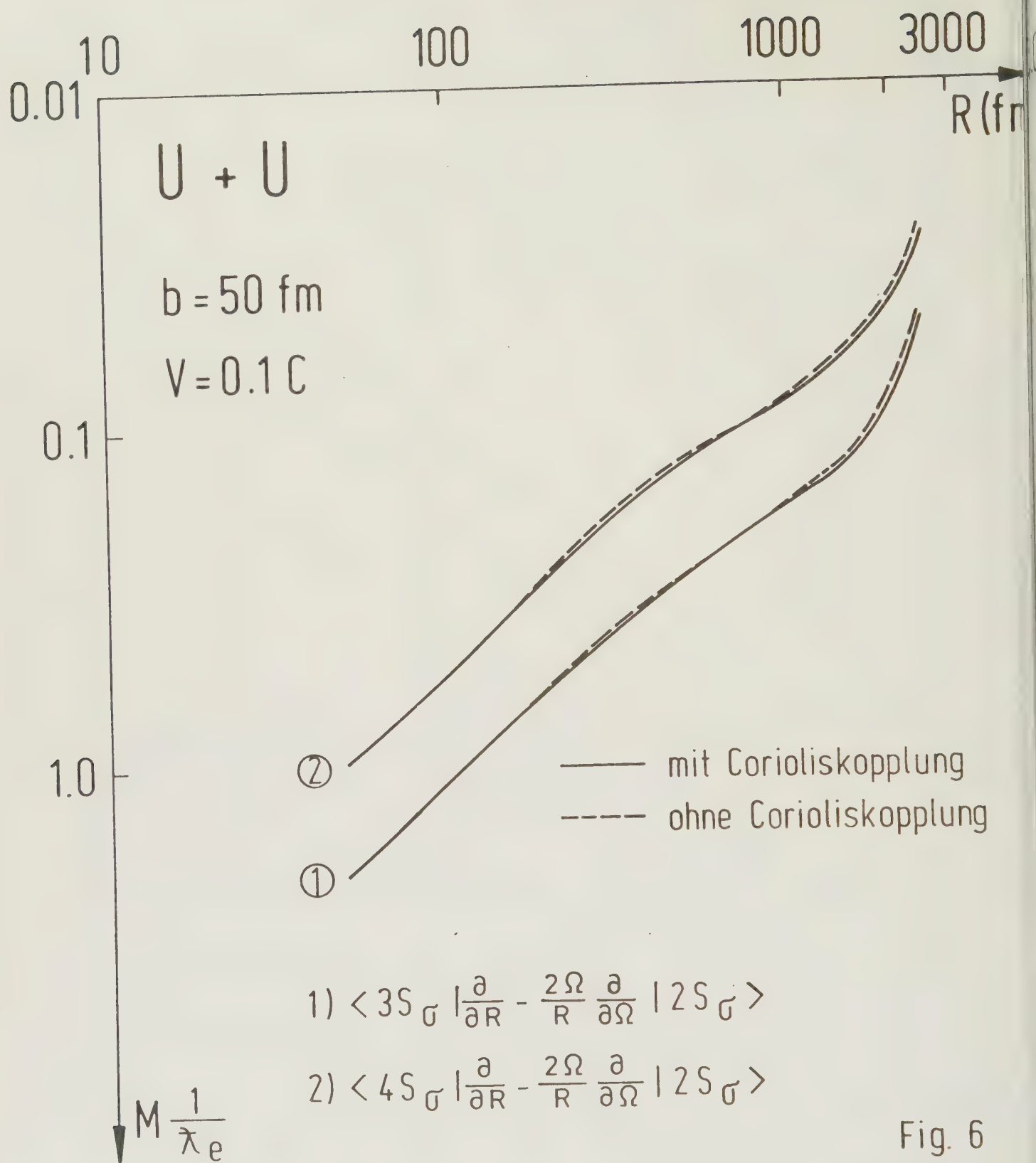


Fig. 6

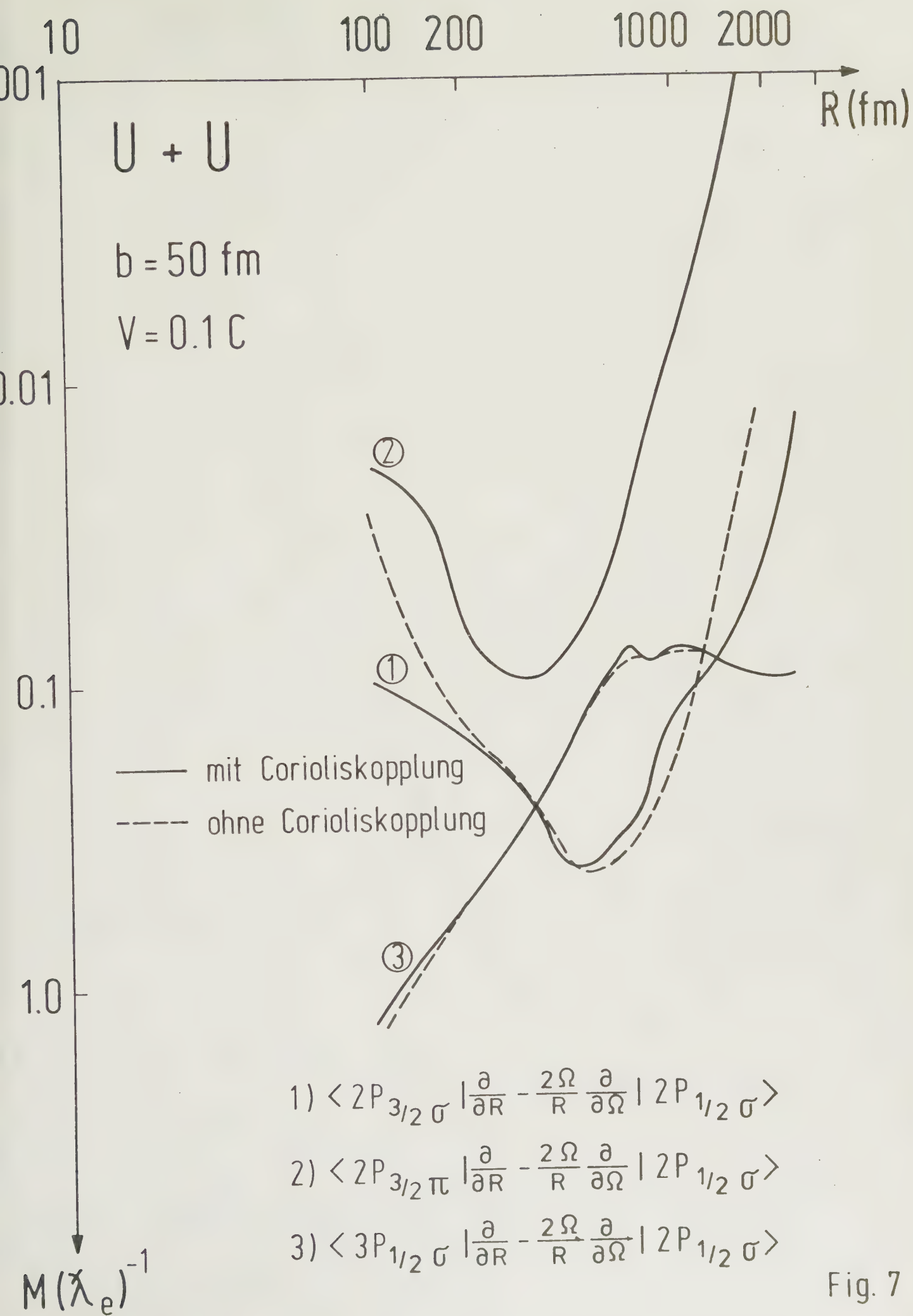


Fig. 7

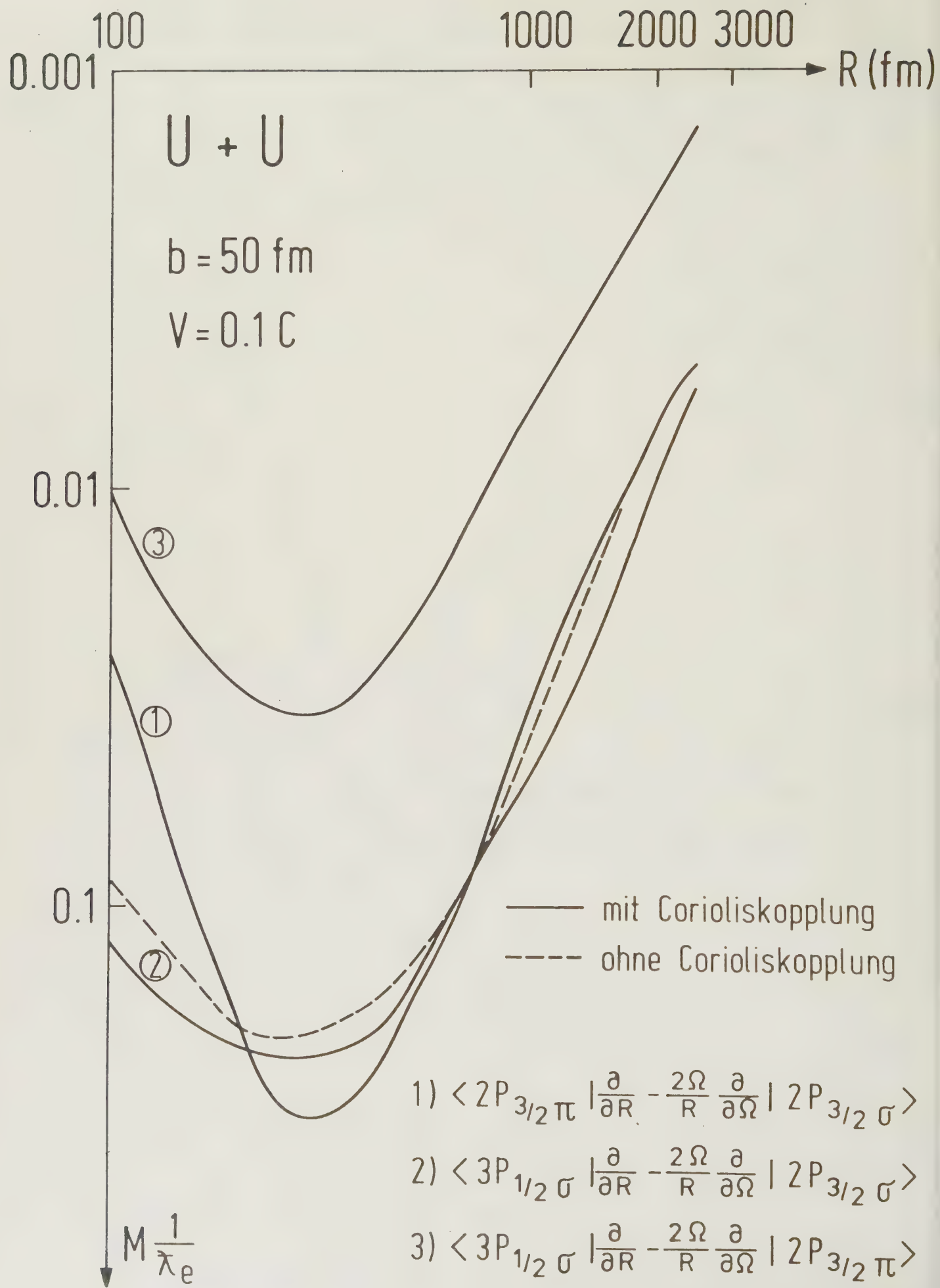


Fig.8

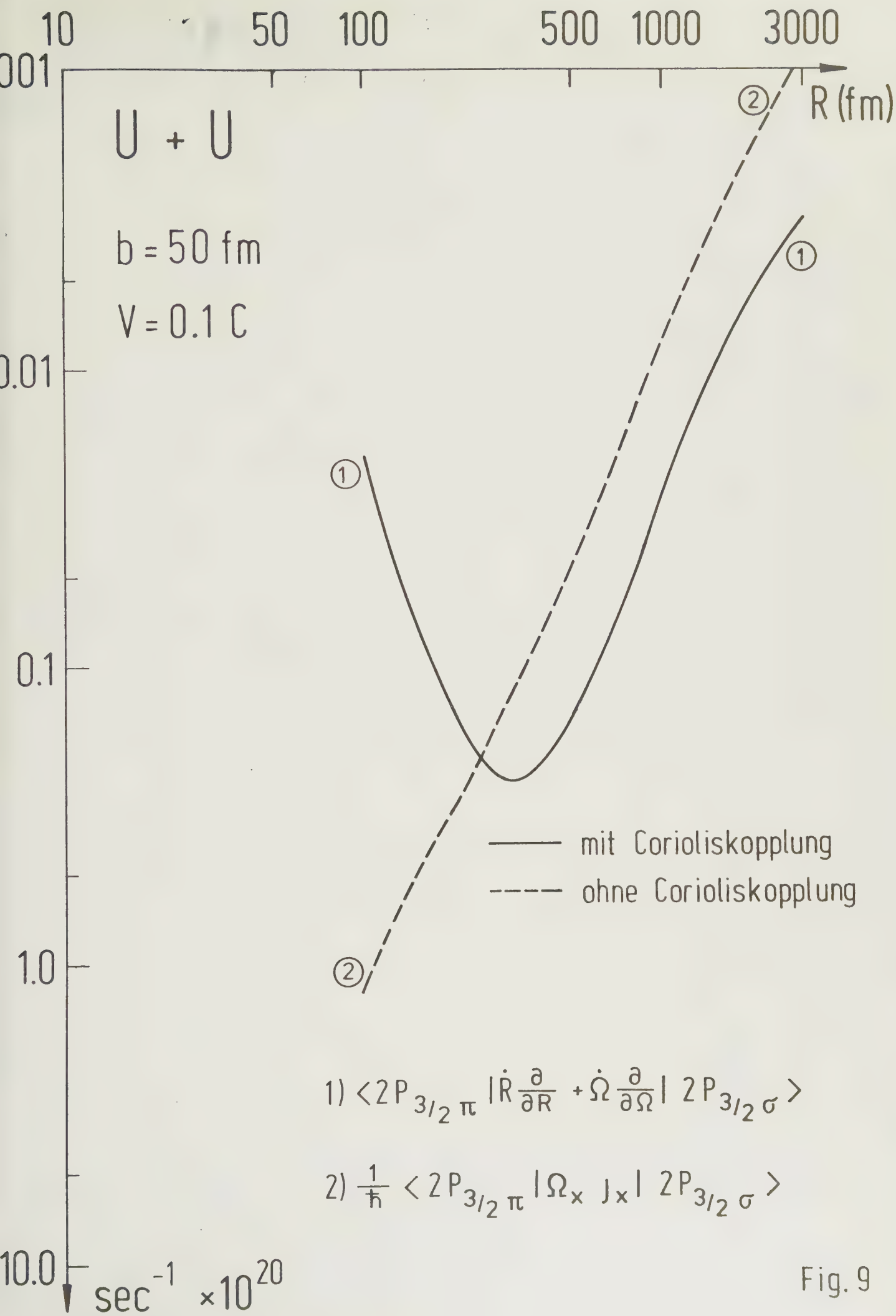


Fig. 9

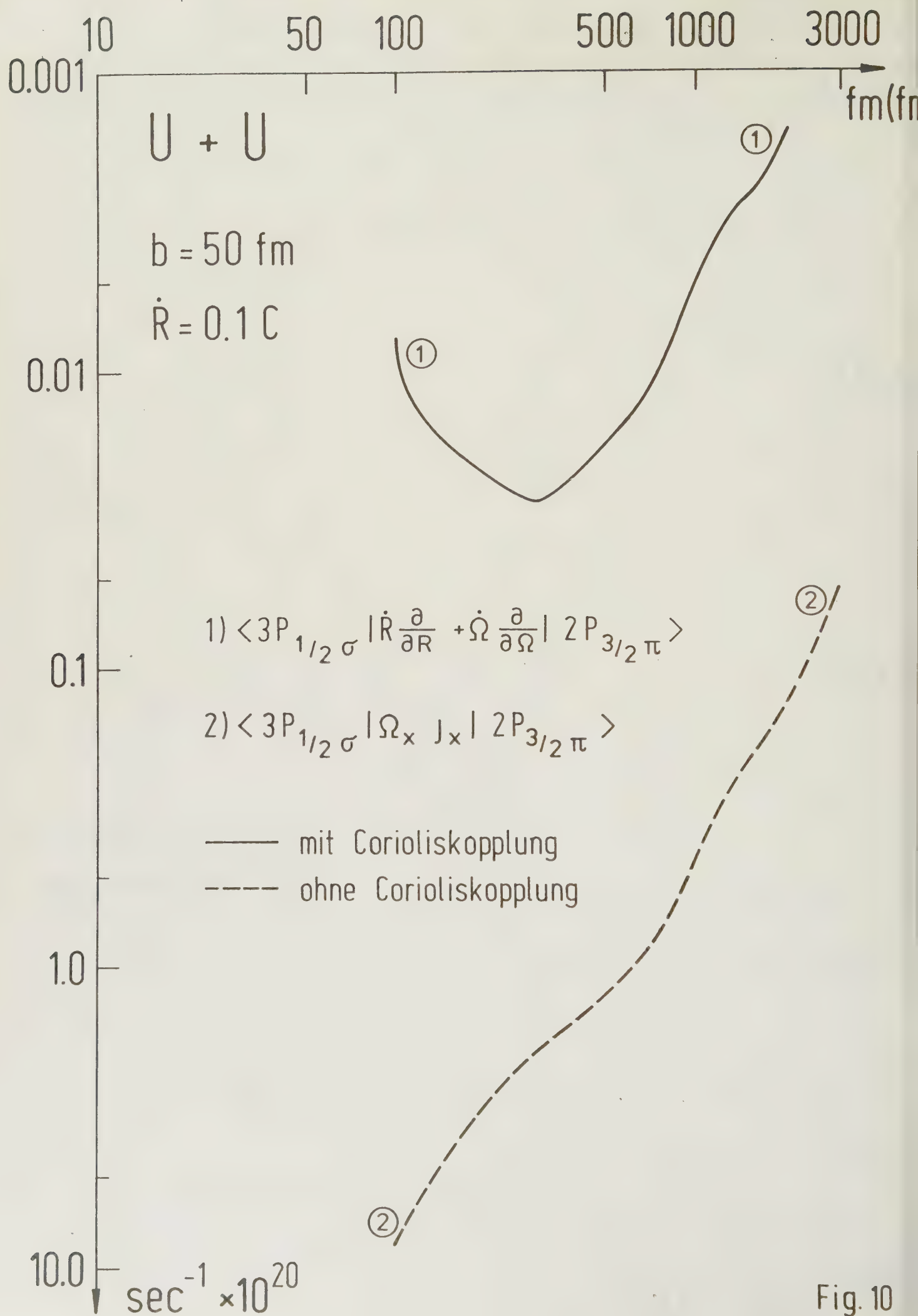


Fig. 10

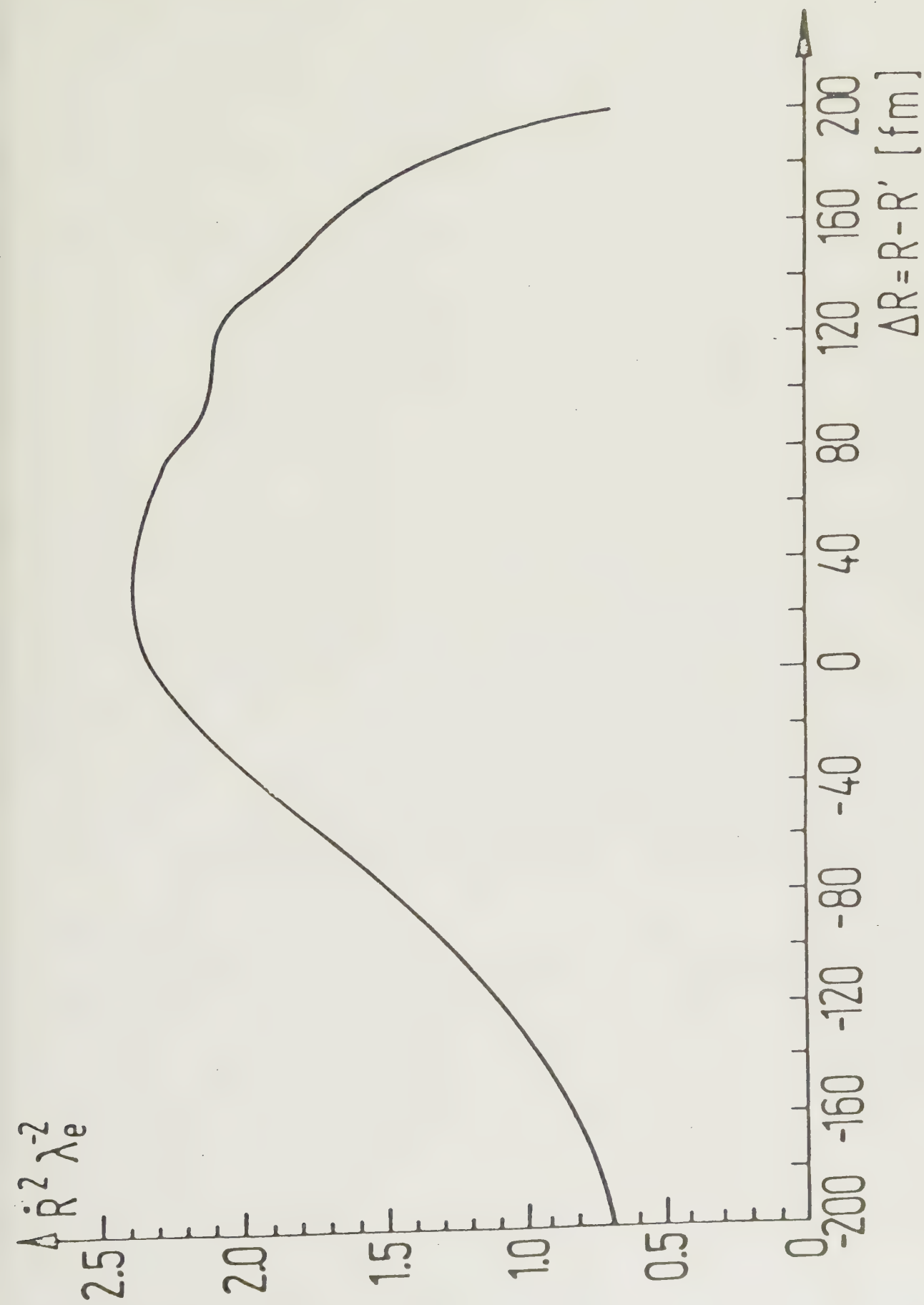


Fig. 11

Lebenslauf

Am 11. März 1947 wurde ich, Nouredin Aly, als Sohn des Elsayed Aly und seiner Ehefrau Nourelhoda in Alexandria/Ägypten geboren. Von 1952 bis 1956 besuchte ich in Alexandria die Belkeis Primary School, von 1956 bis 1960 die Elattarien Preparatory School. In den folgenden drei Jahren war ich Schüler der Raas Eltien Secondary School in Alexandria, an der ich im Juli 1963 das Abitur bestand.

Von 1963 bis 1967 habe ich an der naturwissenschaftlichen Fakultät der Alexandria Universität Physik, Mathematik und Chemie studiert. Seitdem bin ich an der Physikabteilung der naturwissenschaftlichen Fakultät als wissenschaftlicher Mitarbeiter tätig. Von 1968 bis 1971 fertigte ich meine Magisterarbeit an.

Seit 1975 bin ich am Institut für theoretische Physik der Johann Wolfgang Goethe Universität zu Frankfurt am Main bei Prof. Dr. W. Greiner, wo ich an meiner Dissertation arbeite.

Meine akademischen Lehrer waren die Herren Professoren: M. El-Nadi, M. El sherbiny, Y.S. Seliem, A. Arafa, L. Abu Hadid, M. Lasheen, M. Abdel Wahab, M. El-Meligy, W. Bessaly, Z. Morsi, M. Alexan, S. Gouda, W. Greiner, B. Müller, R. Dreizler, J.A. Maruhn, W. Scheid, R. Bass, Th.W. Elze, M. Reichert, J. Weidmann, B. Mrowka und F. Constantinescu.

Meinem verehrten Lehrer, Herrn Prof.Dr. W. Greiner bin ich zu Dank verpflichtet für die Anregung zu dieser Arbeit und sein Interesse. Mein besonderer Dank gilt Prof.Dr. B. Müller, der mir immer zahlreiche Hilfen und Ratschläge gab.

Den Herren Dr. T. Rihan und W. Betz danke ich für viele hilfreiche Diskussionen, Herrn J. Hahn für seine Hilfe beim Formulieren der Arbeit. Des weiteren gilt mein Dank allen Kolleginnen und Kollegen im Institut für gute Zusammenarbeit.

Ferner danke ich Frau Utschig und Frl. Roth für das Fertigstellen der Zeichnungen und Herrn Brose für den Druck der Arbeit.

Die Computerzeit wurde vom Rechenzentrum der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt zur Verfügung gestellt.

